

307 226
52
1984
W.
MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

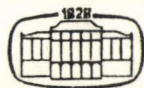
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratszfűzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat fűzetben, fűzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

PION-KONDENZÁLT ÉS NORMÁL ÁLLAPOTÚ, ANIZOTROP MAGANYAG FÁZISEGYENSÚLYA*

SAILER KORNÉL**, NÉMETH JUDIT*** és LOVAS ISTVÁN****

A Walecka-modell keretében átlagtér-közelítésben vizsgáltuk véges hőmérsékletű végtelen maganyag állapotegyenletét és anizotrópiáját a pion-kondenzált fázisban. Rögzített hőmérséklet és kémiai potenciál esetén a pion-kondenzált maganyag a termodinamikai egyensúly állapotában izotrop. Rögzített hőmérséklet és átlagos nyomás esetén a pion-kondenzált maganyag ugyanolyan jellegű anizotrópiával rendelkezik mint a nehézion-ütközésekben keletkező anizotrop normál maganyag. A nem egyensúlyi anizotrop normál és pion-kondenzált fázisok egyensúlya megvalósulhat az anizotrópia reális értékeinél, azaz a normál fázis anizotrópiája nem lehet a fázisátalakulás akadálya a vizsgált modell szerint. A normál — pion-kondenzált fázisátalakulás látens hő képződésével jár.

BEVEZETÉS

Úgy tűnik, hogy a nehézion-reakciókban kísérletileg (földi körülmények között) lehet elérni olyan sűrűség- és hőmérséklettartományt, amelyben az ütköző atommagok eredetileg normálfázisú anyaga pion-kondenzált fázisúvá alakulhat át [1].

A maganyag pion-kondenzált fázisban térben periódikus szerkezettel rendelkezik [2], s ez várhatóan anizotrópiával jár együtt, amely például a mechanikai feszültség-tenzor anizotrópiájában jut kifejezésre. Ugyanakkor a termodinamikai egyensúly állapotában a vákuumban magára hagyott rendszer anizotrópiája várhatóan megszűnik. Vizsgálni kívánjuk, hogy a pion-kondenzált maganyag milyen anizotrópiával rendelkezik.

A nehézion-reakció kezdetén a két ütköző mag anyaga egymás ellenében áramlik, így anizotrop normál maganyaggal van dolgunk [3]; abszolút zérus fokon a betöltött nukleon-állapotok az impulzus-térben két egymáshoz képest eltolt Fermi-gömb belsejét töltik ki. A kérdés csak az, hogy ez az eleve meglevő anizotrópia nem akadályozza-e az esetleges fázisátalakulást. Megvizsgáljuk, hogy kielégíthetők-e a fázis-egyensúly feltételei a maganyag két, nem termodinamikai egyensúlyban levő fázisa, az anizotrop normál fázis és a pion-kondenzált fázis között.

* Érkezett 1983. július 7.

** Kísérleti Fizikai Intézet, Kossuth Lajos Tudományegyetem, Debrecen.

*** Elméleti Fizikai Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Budapest.

**** Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest.

1. A pion-kondenzált fázis

A pion-kondenzált fázis a maganyag egyik lehetséges fázisállapota, amelyben a nukleonok jól meghatározott térbeli periodicitással rendelkező spin-izospinrácsot alkotnak. Ez azt jelenti, hogy van olyan, a nukleonok spinjéből és izospinjéből megalkotható, mérhető fizikai mennyiség (pl. az ún. spin-izospinsűrűség), amely a térben periodikusan változik. A nukleonok mellett mezonok is vannak jelen a pion-kondenzált maganyagban, amelyeknek zöme a számára rendelkezésre álló legalacsonyabb energiájú egyrészecske-állapotot tölti be, azaz kondenzált állapotban van és így véges amplitúdójú klasszikus térként viselkedik. A mezonterek önkölcsönhatása felső korlátot szab amplitúdóiknak.

Pion-kondenzált fázisban a piontér várható értéke, $\langle \vec{\pi} \rangle$ nem zérus: $\langle \vec{\pi} \rangle \neq 0$. Mivel a pionok pszeudoskalár-izovektor részecskék, a várható érték abszolút zérus fokon akkor és csak akkor különbözhet zérustól, ha a pion-kondenzált alapállapot nem izospin-sajátállapot. Ez azt jelenti, hogy a pion-kondenzált alapállapot spontán szimmetriasértő, hiszen az erős kölcsönhatás töltésinvariáns.

A normál fázisból a pion-kondenzált fázisba történő átmenet során tehát a rendszer szimmetriáinak a száma ugrásszerűen csökken. A pion-kondenzált állapot tehát a rendszer állapotjellemzőinek bármilyen értéke esetén határozottan megkülönböztethető a normál állapottól. A pion-kondenzált és a normál fázis egyensúlyát megadó görbe a fázisdiagramon ezért nem végződhet egy pontban (kritikus pont). Ha ugyanis a fázisegyensúlyi görbe kritikus pontban végződne, akkor a görbe egyik oldalán levő valamely állapotból el lehetne jutni a görbe másik oldalán levő bármely állapotba a kritikus pont megkerülésével is (a fázisegyensúlyi görbe átmetszése nélkül), miközben a rendszer valamennyi állapotjellemzője folytonosan változna. Ilyenkor a rendszer két fázisáról csak feltételesen lehet beszélni, ha azok egyidejűleg vannak jelen. Ekkor a görbe két oldalán levő állapotok szimmetriája nem különbözhetne, hiszen a szimmetria megváltozása mindig ugrásszerűen következik be és sohasem folytonosan. A maganyag esetében azonban a normál fázis töltésszimmetrikus míg a pion-kondenzált fázis nem. Éppen ezért a maganyag szóban forgó fázisátalakulása klasszikus folyadék szilárdtestté való átalakulására (fagyás) emlékeztet. További hasonlóság, hogy amíg a normál fázisban a maganyag tetszőleges térbeli eltolással szemben invariáns, addig a pion-kondenzált fázisban csak bizonyos eltolásokkal szemben mutat invarianciát. A pion-kondenzált fázisban a piontér várható értéke $d=2\pi/|\vec{k}|$ periódussal változik a térben, és a nukleonok a periódikus piontérrel kölcsönhatva maguk is d periódusú spin-izospinszerkezetbe rendeződnek: ahol a „felfelé” („lefelé”) álló spinű és „felfelé” („lefelé”) álló izospinű nukleonok sűrűségének maximuma van, ott a „felfelé” („lefelé”) álló spinű de „lefelé” („felfelé”) álló izospinű nukleonok sűrűsége minimális. A rendszer csak a \vec{k} és $-\vec{k}$ irányú $d, 2d, 3d, \dots$ nagyságú eltolásokkal szemben invariáns.

2. A maganyag téregyenletei

Rátérünk a bevezetőben vázolt feladat megoldására. Feltesszük, hogy normál fázisban a maganyag két egymással szemben áramló részből áll és ezért anizotrop. Esetleges fázisátalakulás esetén az anizotrop normál fázisban levő maganyag pion-kondenzált (és így szintén anizotrop) maganyaggá alakul át.

A rendszer Lagrange-sűrűségében a ψ nukleontéren kívül $\sigma(J^\pi=0^+, T=0)$, $\vec{\pi}(0^-, 1)$ és $\omega_\mu(1^-, 0)$ mezontereket vesszük figyelembe, amelyeket Yukawa-típusú kölcsönhatással csatolunk a nukleontérhez. A σ és π mezonokkal a NN-kölcsönhatás kétpion- és egypion-kicserélő vonzó részét, az ω vektormezonokkal pedig a NN-kölcsönhatás rövidhatótávolságú tasztító részét tudjuk leírni. Ezen mezonterek figyelembevételére esetén az elmélet képes helyesen visszaadni a normál alapállapotú maganyag térfogati tulajdonságait (sűrűségét, kötési energiáját és kompresszió modulusát), ha a csatolási állandókat és a σ tér önkölcsönhatásának erősségét alkalmasan választjuk meg [4].

A rendszer Lagrange-sűrűsége

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{sz} + \mathcal{L}_{kh}, \quad (2.1)$$

ahol a szabad terek Lagrange-sűrűsége

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{sz} = & \bar{\psi}(i\gamma^3\partial_s - m)\psi + \frac{1}{2}(\partial_s\sigma\partial^s\sigma - m_\sigma^2\sigma^2) - U(\sigma) + \\ & + \frac{1}{2}(\partial_s\vec{\pi}\partial^s\vec{\pi} + m_\pi^2\vec{\pi}\vec{\pi}) - \frac{1}{4}\omega_{st}\omega^{st} + \frac{1}{2}m_\omega^2\omega_s\omega^s, \end{aligned} \quad (2.2)$$

és a terek kölcsönhatását az

$$\mathcal{L}_{kh} = g_\sigma\sigma\bar{\psi}\psi - g_\omega\omega_s\bar{\psi}\gamma^s\psi - g_\pi\partial_s\vec{\pi}\bar{\psi}\gamma_5\gamma^s\vec{\tau}\psi \quad (2.3)$$

Lagrange-sűrűség írja le. Itt m , m_σ , m_π és m_ω a szabad nukleon, a σ , π és ω mezon nyugalmi tömegei; g_σ , g_π és g_ω a megfelelő csatolási állandók, továbbá

$$\omega_{st} = \partial_s\omega_t - \partial_t\omega_s. \quad (2.4)$$

A σ skalártér önkölcsönhatását leíró potenciálsűrűséget

$$U(\sigma) = \left(\frac{1}{3}bm + \frac{1}{4}cg_\sigma\sigma\right)(g_\sigma\sigma)^3 \quad (2.5)$$

alakúnak választjuk; b és c állandók. A pion-nukleon-kölcsönhatásban nagy energián a szórás kísérletek tanúsága szerint a p-hullámú járulékok az uralkodók, ezért a kölcsönhatási Lagrange-sűrűség (2.3) kifejezésében pszeudovektor-pszeudovektor csatolást alkalmaztunk a pion- és nukleontér kölcsönhatásának leírására.

A (2.1)–(2.3) Lagrange-sűrűségből az alábbi téregyenletek származtathatók le:

$$(i\gamma^s\partial_s - m + g_\sigma\sigma - g_\omega\gamma^s\omega_s - g_\pi\gamma_5\gamma^s\partial_s\vec{\pi}\cdot\vec{\tau})\psi = 0, \quad (2.6)$$

$$(\square + m_\sigma^2)\sigma = g_\sigma\bar{\psi}\psi - \frac{dU}{d\sigma}, \quad (2.7)$$

$$(\square + m_\pi^2)\vec{\pi} = g_\pi\partial_s(\bar{\psi}\gamma_5\gamma^s\vec{\tau}\psi), \quad (2.8)$$

$$(\square + m_\omega^2)\omega_n - \partial_n\partial^s\omega_s = g_\omega\bar{\psi}\gamma_n\psi. \quad (2.9)$$

A rendszer energia-impulzus-tenzora

$$T^{nm} = \frac{i}{2} (\bar{\psi} \gamma^m \psi^{;n} - \bar{\psi}^{;n} \gamma^m \psi) + \bar{\pi}^{;m} \pi^{;n} - g_{\pi} \bar{\pi}^{;n} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^m \hat{\tau} \psi + \sigma^{;m} \sigma^{;n} - (\omega^{s;m} - \omega^{m;s}) \omega_s^{;n} - g^{nm} \mathcal{L}. \quad (2.10)$$

Vegyük észre, hogy az energia-impulzus-tenzor szokásos

$$T^{nm} = \dot{u}_a^{;n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}_{a;m}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{a;m}} u_a^{;n} - g^{nm} \mathcal{L}$$

(u_a a független térkomponenseket jelöli) definíciójával leszámaztatott (2.10) kifejezés nem szimmetrikus az m és n indexekben. Ahhoz, hogy az energia-impulzus-tenzorból leszámaztatható fizikai mennyiségek sűrűségét is helyesen kapjuk meg, az energia-impulzus-tenzor (2.10) kifejezéséből a rendszert jellemző globális fizikai mennyiségek (pl. teljes energia, impulzus) szempontjából az eredetivel ekvivalens szimmetrikus tenzort kell alkotnunk (ld. A. Függelék). A szimmetrikus energia-impulzus-tenzor:

$$\begin{aligned} T'^{nm} = & \frac{i}{4} \{ (\bar{\psi} \gamma^m \psi^{;n} - \bar{\psi}^{;n} \gamma^m \psi) + (\bar{\psi} \gamma^n \psi^{;m} - \bar{\psi}^{;m} \gamma^n \psi) \} - \\ & - \omega^{s;m} \omega_s^{;n} - \omega^{m;s} \omega_{;s}^n + (\omega^{m;s} \omega_s^{;n} + \omega^{n;s} \omega_s^{;m}) + \\ & + m_\omega^2 \omega^m \omega^n + \bar{\pi}^{;m} \pi^{;n} + \sigma^{;m} \sigma^{;n} - \\ & - \frac{1}{4} g_\omega \omega_s \bar{\psi} (\gamma^n \gamma^s \gamma^m + \gamma^m \gamma^s \gamma^n) \psi - \\ & - \frac{1}{4} g_\pi \bar{\pi}_{;s} \bar{\psi} \gamma_5 (\gamma^n \gamma^s \gamma^m + \gamma^m \gamma^s \gamma^n) \hat{\tau} \psi + \\ & + g^{nm} \left\{ U(\sigma) - \frac{1}{2} (\sigma_{;s} \sigma^{;s} - m_\sigma^2 \sigma^2) + \right. \\ & + \frac{1}{4} \omega_{ts} \omega^{ts} - \frac{1}{2} m_\omega^2 \omega_s \omega^s - \frac{1}{2} (\bar{\pi}_{;s} \pi^{;s} - m_\pi^2 \bar{\pi} \pi) - \\ & \left. - \frac{1}{2} g_\omega \omega_s \bar{\psi} \gamma^s \psi - \frac{1}{2} g_\pi \bar{\pi}_{;s} \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^s \hat{\tau} \psi \right\}. \quad (2.11) \end{aligned}$$

3. Az átlagtér-közelítés

A (2.6)–(2.9) téregyenletek átlagtér-közelítésben egzaktul megoldhatók. Az átlagtér-közelítés főbb lépései a következők:

- A mezonterek operátorait és a forrásait jelentő áramsűrűségeket makrokanonikus átlagukkal helyettesítjük;
- a csatolási állandók helyére olyan renormált értékeket írunk, amelyekkel a normál maganyag térfogati tulajdonságait le tudjuk írni;

c) a mezonterekre kapott szelf-konzisztens egyenleteket megoldjuk.

A szelf-konzisztens egyenletek megoldásainak birtokában kiszámíthatjuk a minket érdeklő fizikai mennyiségeket.

Végtelen homogén maganyagban termodinamikai egyensúlyi állapotban $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$ és $\langle \bar{\psi} \gamma^s \psi \rangle$ helytől és időtől független állandók,

$$\langle \sigma \rangle = \bar{\sigma}, \quad \langle \omega_n \rangle = \omega_n. \quad (3.1)$$

A maganyag koordinátatérbeli izotrópiájából következik, hogy $\bar{\omega}_\alpha = 0$ ($\alpha = 1, 2, 3$), csak $\bar{\omega}_0 \neq 0$.

A téregyenletek átlagtér-közelítésben az alábbi alakot öltik:

$$(i\gamma^s \partial_s - m + g_\sigma \bar{\sigma} - g_\omega \gamma^s \bar{\omega}_s - g_\pi \gamma_5 \gamma^s \partial_s \langle \vec{\pi} \rangle \cdot \vec{\tau}) \psi = 0, \quad (3.2)$$

$$m_\sigma^2 \bar{\sigma} = g_\sigma \langle \bar{\psi} \psi \rangle - \left\langle \frac{dU}{d\sigma} \right\rangle, \quad (3.3)$$

$$(\square + m_\pi^2) \langle \vec{\pi} \rangle = g_\pi \langle \partial_s \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^s \vec{\tau} \psi \rangle, \quad (3.4)$$

$$m_\omega^2 \bar{\omega}_0 = g_\omega \langle \bar{\psi} \gamma_0 \psi \rangle.$$

A (3.2) Dirac-egyenletből az is látszik, hogy meg kell engednünk $\langle \vec{\pi} \rangle$ függését a téridő-koordinátáktól, mert máskülönben nem lehetséges p-hullámú pion-nukleon-kölcsönhatás.

A továbbiakban olyan megoldást keresünk, amely szimmetrikus maganyagban ($N=Z$) töltött pionok (π^\pm) kondenzációjának felel meg. Ilyen esetben $\langle \vec{\pi} \rangle$ csak a helykoordinátáktól függ, az időtől független [5], ugyanis

$$\langle \vec{\pi} \rangle = \langle \vec{\pi}(\vec{x}) \rangle e^{i(\mu_n - \mu_p)x^0},$$

de szimmetrikus maganyagban a neutronok és a protonok kémiai potenciálja egyenlő, $\mu_n = \mu_p$. A (2.8) szelf-konzisztens egyenlet megoldását a

$$\langle \vec{\pi} \rangle = \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \{ \vec{u} (\sin \vec{k}\vec{x} - \cos \vec{k}\vec{x}) - \vec{v} \times \vec{u} (\sin \vec{k}\vec{x} + \cos \vec{k}\vec{x}) \} \quad (3.6)$$

alakban keressük, ahol $\bar{\pi}$ a szelf-konzisztens egyenletek megoldásaként adódó állandó (a pionter amplitúdója), \vec{k} a pionter térbeli periodicitását megadó hullámvektor ($k \equiv (\vec{k}, k^0)$, $k^0 = 0$); \vec{u} , $\vec{v} \times \vec{u}$ és \vec{v} három, páronként egymásra merőleges egységvektor az izospinterben, $\vec{u}(1, 0, 0)$, $\vec{v} \times \vec{u}(0, 1, 0)$ és $\vec{v}(0, 0, 1)$. Alább megmutatjuk, hogy a (2.7)–(2.9) egyenleteknek valóban létezik (3.1) és (3.6) által megadott alakú megoldása.

A töltött pionterek (3.6) alapján

$$\langle \pi^{(+)} \rangle = - \left\langle \frac{\pi_1 - i\pi_2}{\sqrt{2}} \right\rangle = \frac{\bar{\pi}}{2} [(1-i) \cos \vec{k}\vec{x} - (1+i) \sin \vec{k}\vec{x}], \quad (3.7)$$

$$\langle \pi^{(-)} \rangle = \left\langle \frac{\pi_1 + i\pi_2}{\sqrt{2}} \right\rangle = \frac{\bar{\pi}}{2} [(1-i) \sin \vec{k}\vec{x} - (1+i) \cos \vec{k}\vec{x}] = - \langle \pi^{(+)} \rangle^*, \quad (3.8)$$

$$\langle \pi^{(0)} \rangle = \langle \pi_3 \rangle = 0, \quad (3.9)$$

s így a piontér töltéssűrűsége mindenütt zérus,

$$q_\pi(\vec{x}) = |\langle \pi^{(+)} \rangle|^2 - |\langle \pi^{(-)} \rangle|^2 = 0 \quad (3.10)$$

(3.6) alakú megoldás esetén.

Átlagtér-közelítésben a (2.1)–(2.3) Lagrange-sűrűség a (2.6) Dirac-egyenlet felhasználásával

$$\mathcal{L}_{MF} = -\frac{i}{2} (\bar{\psi} \gamma^s \psi_{;s} + \bar{\psi}_{;s} \gamma^s \psi) - \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) \quad (3.11)$$

alakba írható át, ahol

$$\epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) = \frac{1}{2} m_\sigma^2 \bar{\sigma}^2 + U(\bar{\sigma}) + \frac{1}{2} (m_\pi^2 + \vec{k}^2) \bar{\pi}^2 - \frac{1}{2} m_\omega^2 \bar{\omega}_0^2. \quad (3.12)$$

A (2.11) energia-impulzus-tenzor átlagtér-közelítésben:

$$\begin{aligned} T_{MF}^{\prime nm} = & \frac{i}{4} \{ (\bar{\psi} \gamma^m \psi_{;n} - \bar{\psi}_{;n} \gamma^m \psi) + (\bar{\psi} \gamma^n \psi_{;m} - \bar{\psi}_{;m} \gamma^n \psi) \} + \\ & + m_\omega^2 \bar{\omega}^m \bar{\omega}^n + \langle \vec{\pi};^m \rangle \langle \vec{\pi};^n \rangle - \\ & - \frac{1}{4} [\bar{\psi} (g_\omega \bar{\omega}_s + g_\pi \langle \vec{\pi};_s \rangle \gamma_5 \vec{\tau}) (\gamma^n \gamma^s \gamma^m + \gamma^m \gamma^s \gamma^n) \psi] + \\ & + g^{\pi m} \left\{ \frac{1}{2} m_\sigma^2 \bar{\sigma}^2 + U(\bar{\sigma}) - \frac{1}{2} m_\omega^2 \bar{\omega}_s \bar{\omega}^s - \right. \\ & - \frac{1}{2} (\langle \vec{\pi};_s \rangle \langle \vec{\pi};^s \rangle - m_\pi^2 \langle \vec{\pi} \vec{\pi} \rangle) - \\ & \left. - \frac{1}{2} g_\omega \bar{\omega}_s \bar{\psi} \gamma^s \psi - \frac{1}{2} g_\pi \langle \vec{\pi};_s \rangle \bar{\psi} \gamma_5 \gamma^s \vec{\tau} \psi \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

4. Kvantálás. A kvázinukleonok energiaspektruma

A nukleontér kvantálását a következőképpen végezzük el. Megkeressük a (2.6) Dirac-egyenlethez tartozó energia-sajátállapotok teljes rendszerét. A nukleonteret Fourier-sorba fejtjük az energia-sajátállapotok teljes rendszere szerint, a sorfejtési együtthatókra antikommutátor-relációkat írunk elő, s így azokat keltő és eltüntető operátorokká tesszük. Annak érdekében, hogy a fizikai mennyiségek kifejezéseiben megszabaduljunk a fizikai tartalommal nem rendelkező végtelen tagoktól, a fizikai mennyiségek operátorának normálszorzatával képezzük a makrokanonikus várható értékeket. Ennek szellemében valamennyi korábban felírt kifejezésben a várható érték képzése előtt normálszorzatot képezzük.

Az alábbiakban belátjuk, hogy a feladat egymással kölcsön nem ható, külső térbe helyezett kvázinukleonok rendszerének vizsgálatára vezethető vissza, ha bevezetjük a ψ_v kvázinukleonteret a

$$\psi = R \psi_v, \quad R = \exp \left(-\frac{i}{2} \vec{k} \vec{x} \tau_3 \right) \quad (4.1)$$

definícióval. Ekkor a (2.6) Dirac-egyenletben a nukleonoknak a piontérrel való kölcsönhatásából származó „potenciális energiája” függetlenné válik a téridő-koordinátáktól,

$$\left\{ i\gamma^s \partial_s - m^* - g_\omega \bar{\omega}_0 \gamma^0 + (\vec{\gamma} \vec{k}) \left[\frac{\tau_3}{2} + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\} \psi_v = 0; \quad (4.2)$$

itt $m^* = m - g_\sigma \bar{\sigma}$ a kvázinukleon tömege. A (4.2) egyenlet levezetésekor felhasználtuk az

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{i}{2} \alpha \tau_k\right) \tau_j \exp\left(-\frac{i}{2} \alpha \tau_k\right) = \\ & = \tau_j \cos \alpha + \delta_{jk} \tau_k \sin^2 \frac{\alpha}{2} + \varepsilon_{jkl} \tau_l \sin \alpha \end{aligned} \quad (4.3)$$

összefüggést, ahol α tetszőleges valós szám, ε_{jkl} a teljesen antiszimmetrikus harmadrendű tenzor, $(j, k, l = 1, 2, 3)$.

A rendszer Hamilton-sűrűsége

$$\mathcal{H} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} \dot{\psi} + \dot{\bar{\psi}} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\bar{\psi}}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\sigma}} \dot{\sigma} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\pi}} \dot{\pi} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\omega}_s} \dot{\omega}_s - \mathcal{L}, \quad (4.4)$$

s így átlagtér-közelítésben

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{MF} &= \frac{i}{2} : (\bar{\psi} \gamma^0 \psi^{;0} - \bar{\psi}^{;0} \gamma^0 \psi) : + \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) = \\ &= \frac{i}{2} : (\bar{\psi}_v \gamma^0 \psi_v^{;0} - \bar{\psi}_v^{;0} \gamma^0 \psi_v) : + \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) = \\ &= : \psi_v^+ \left\{ -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \vec{\alpha} + m^* \beta + g_\omega \bar{\omega}_0 - \right. \\ &\quad \left. - (\vec{\alpha} \vec{k}) \left[\frac{1}{2} \tau_3 + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\} \psi_v : + \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0), \end{aligned} \quad (4.5)$$

ahol

$$\vec{\alpha} = \gamma^0 \vec{\gamma}, \quad \beta = \gamma^0.$$

Vezessük be a Schrödinger-képbeli

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{MF}(x^0 = 0), \quad \psi_{vS}(\vec{x}) = \psi_v(\vec{x}, x^0 = 0), \quad \bar{\psi}_{vS}(\vec{x}) = \bar{\psi}_v(\vec{x}, x^0 = 0) \quad (4.6)$$

operátorokat. Legyenek $U^\lambda(\vec{p})$ és $V^\lambda(\vec{p})$ $4 \times 2 = 8$ elemű spinorok a (4.2) Dirac-egyenlet $E_\lambda^{(+)}(\vec{p})$ energiájú részecskéket és $E_\lambda^{(-)}(\vec{p})$ energiájú antirészecskéket leíró megoldásai impulzus-reprezentációban;

$$\left\{ \vec{p} \vec{\alpha} + \beta m^* - (\vec{\alpha} \vec{k}) \left[\frac{\tau_3}{2} + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\} U^\lambda(\vec{p}) = [E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - g_\omega \bar{\omega}_0] U^\lambda(\vec{p}), \quad (4.7)$$

$$\left\{ -\vec{p} \vec{\alpha} + \beta m^* - (\vec{\alpha} \vec{k}) \left[\frac{\tau_3}{2} + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\} V^\lambda(\vec{p}) = [E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - g_\omega \bar{\omega}_0] V^\lambda(\vec{p}). \quad (4.8)$$

Normáljuk a spinorokat úgy, hogy

$$U^\lambda(\vec{p})^+ U^{\lambda'}(\vec{p}') = V^\lambda(\vec{p})^+ V^{\lambda'}(\vec{p}') = \delta_{\lambda\lambda'},$$

$$U^\lambda(\vec{p})^+ V^{\lambda'}(\vec{p}') = 0 \quad (\lambda = 1, 2, 3, 4) \quad (4.9)$$

legyen.

Fejtsük sorba a kvázinukleontér operátorát az energiasajátállapotok teljes rendszere szerint:

$$\psi_{vS}(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{e^{i\vec{p}\vec{x}} b_\lambda(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p}) + e^{-i\vec{p}\vec{x}} d_\lambda^+(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})\}, \quad (4.10)$$

$$\psi_{vS}^+(\vec{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{e^{i\vec{p}\vec{x}} d_\lambda(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})^+ + e^{-i\vec{p}\vec{x}} b_\lambda^+(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p})^+\}. \quad (4.11)$$

A kvázinukleontér Fourier-amplitúdóira a szokásos felcserélési relációkat írjuk elő:

$$\{b_\lambda(\vec{p}), b_{\lambda'}^+(\vec{p}')\} = \{d_\lambda(\vec{p}), d_{\lambda'}^+(\vec{p}')\} = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\vec{p}\vec{p}'}, \quad (4.12)$$

az összes többi antikommutátor zérus.

A fizikai mennyiségek kifejezéseiben a b, b^+, d és d^+ operátorok sorrendjét normálszorzat segítségével rögzítjük.

Behelyettesítve a téroperátorok (4.10) és (4.11) kifejezését a (4.5) Hamilton-sűrűségbe, a (4.7) és (4.8) egyenletek, valamint a (4.12) felcserélési relációk felhasználásával azt találjuk, hogy

$$\mathcal{H}_S = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) b_\lambda^+(\vec{p}) b_\lambda(\vec{p}) - E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) d_\lambda^+(\vec{p}) d_\lambda(\vec{p})\} + \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0). \quad (4.13)$$

Tehát, valóban, a (4.13) Hamilton-sűrűség kölcsön nem ható kvázinukleon-rendszert ír le.

A Schrödinger-képről a Heisenberg-képre az

$$O_H(x) = e^{iHx^0} O_S(\vec{x}) e^{-iHx^0} \quad (4.14)$$

képlettel térhetünk át, ahol $O_S(\vec{x})$ és $O_H(x)$ tetszőleges operátor a Schrödinger-, ill. a Heisenberg-képben;

$$H = V\mathcal{H}_S = V\mathcal{H}_H.$$

A kvázinukleontér operátora Heisenberg-képben

$$\psi_v(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{e^{i\vec{p}\vec{x} - iE_\lambda^{(+)}x^0} b_\lambda(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p}) + e^{-i\vec{p}\vec{x} - iE_\lambda^{(-)}x^0} d_\lambda^+(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})\}, \quad (4.15)$$

$$\psi_v^+(x) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{e^{i\vec{p}\vec{x} + iE_\lambda^{(-)}x^0} d_\lambda(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})^+ + e^{-i\vec{p}\vec{x} + iE_\lambda^{(+)}x^0} b_\lambda^+(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p})^+\}. \quad (4.16)$$

A kvázinukleonok energiaspektrumát legegyszerűbben úgy kaphatjuk meg, ha megkeressük a (4.2) Dirac-egyenlethez tartozó Green-függvény pólusait impulzus-

reprezentációban. A szóban forgó Green-függvénynek

$$G(p) = \left\{ \gamma^s P_s - m^* - \gamma^s k_s \left[\frac{\tau_3}{2} + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\}^{-1} = \frac{N(p)}{D(p)} =$$

$$= \frac{\{(PP) - \varepsilon^2 + (Pk) \tau_3 + 2g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} (Pk + m^* \gamma^s k_s) \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2)\}}{[(PP) - \varepsilon^2]^2 - (Pk)^2 (1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2) + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2 m^{*2} (kk)} \times$$

$$\times \left\{ \gamma^s P_s + m^* - \gamma^s k_s \left[\frac{\tau_1}{2} + g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_2 - \tau_1) \right] \right\}, \quad (4.17)$$

ahol

$$P^n = p^n - g_\omega^{0n} \bar{\omega}_0 \quad \text{és} \quad \varepsilon^2 = m^{*2} - \left(\frac{1}{4} + g_\pi^2 \bar{\pi}^2 \right) (kk),$$

pólusai vannak a nevező zérushelyein,

$$D(p) = 0. \quad (4.18)$$

Innen

$$E_\lambda^{(\pm)}(\vec{p}) = p_0 = g_\omega \bar{\omega}_0 + P_0 = g_\omega \bar{\omega}_0 \pm E_t(\vec{p}), \quad (4.19)$$

ahol

$$E_t(\vec{p}) = (\vec{p}^2 + \varepsilon^2 + t\Delta^2)^{1/2}, \quad (\lambda = (s, t); \quad s, t = \pm 1) \quad (4.20)$$

$$\Delta^2 = |\vec{k}| \{ (1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2) p_\parallel^2 + (2g_\pi \bar{\pi} m^*)^2 \}^{1/2}, \quad (4.21)$$

$\vec{p} = (\vec{p}_\perp, p_\parallel)$ a nukleon impulzusának felbontása \vec{k} -ra merőleges és \vec{k} -val párhuzamos összetevőkre.

Látjuk, hogy a pion-kondenzált fázisban az eredetileg spin és izospin szerint $2 \times 2 = 4$ -szeresen elfajult nukleonenergianívók izospin szerint felhasadnak a pion-térrel való kölcsönhatás eredményeként két (spin szerint) kétszeresen elfajult energiaszintre. (Az s kvantumszám ezt a még meglevő elfajulást jelöli.)

5. A termodinamikai egyensúly feltételei

Megmutatjuk, hogy adott T abszolút hőmérséklet és μ kémiai potenciál esetén a (3.3)–(3.5) téregyenletek a rendszer termodinamikai egyensúlyának szükséges feltételei.

Definiáljuk a rendszer makrokanonikus Hamilton-operátorát,

$$K = H - \mu N = \sum_{\vec{p}, \lambda} \{ [E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu] b_\lambda^+(\vec{p}) b_\lambda(\vec{p}) -$$

$$- [E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu] d_\lambda^+(\vec{p}) d_\lambda(\vec{p}) \} + V(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0), \quad (5.1)$$

ahol N a kvázinukleonok száma. A rendszerre vonatkozó állapotösszeg

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta K}, \quad (\beta = 1/T) \quad (5.2)$$

ahol Tr a rendszer összes mikroállapotai szerinti spurképzést jelöl. A rendszer termodinamikai potenciálja

$$\Omega = -T \ln Z \quad (5.3)$$

és a makrokanonikus statisztikus operátor

$$\varrho_G = e^{\beta(\Omega - K)}. \quad (5.4)$$

Tetszőleges Q fizikai mennyiség makrokanonikus várható értékén a

$$\langle Q \rangle = \text{Tr}(\varrho_G Q) \quad (5.5)$$

mennyiséget értjük.

Az (5.5) definíció alapján kiszámoljuk a véges hőmérsékletű rendszer egyrészecske-operátorainak várható értékét (l. B. Függelék), majd a (3.3)–(3.5) egyenletekben a forrástagokat kifejezzük $\bar{\sigma}$, $\bar{\pi}$, $\bar{\omega}_0$ és \bar{k} függvényeként. A piontérre vonatkozó (3.4) egyenlet (3.6) behelyettesítése után \bar{u} -val, ill. $\bar{v} \times \bar{u}$ -val történő skaláris szorzás hatására két egyenletre esik szét, amelyek azonban pontosan megegyeznek egymással a spurok (B.21e) tulajdonsága miatt:

$$(\bar{k}^2 + m_\pi^2) \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} = g_\pi \langle : \psi_v \gamma_5 (\vec{\gamma} \bar{k}) \tau_2 \psi_v : \rangle = -g_\pi \langle : \bar{\psi}_v \gamma_5 (\vec{\gamma} \bar{k}) \tau_1 \psi_v : \rangle. \quad (5.6)$$

Ez bizonyítja, hogy a feladatnak létezik (3.6) alakú megoldása. (Az (5.6) egyenlet levezetésekor felhasználtuk, hogy a (3.4) egyenlet forrástagja az

$$\partial_n(\bar{\psi} \gamma_5 \gamma^n \bar{\tau} \psi) = \partial_n(\bar{\psi}_v R^+ \gamma_5 \gamma^n \bar{\tau} R \psi_v) = \bar{\psi}_v \gamma_5 \gamma^n \partial_n(R^+ \bar{\tau} R) \psi_v$$

operátort tartalmazza, mert a téroperátorok deriváltjait tartalmazó tagok összege zérus.) Végül a mezonterek amplitúdóinak meghatározására az alábbi transzcendens egyenletrendszert kapjuk:

$$0 = m_\sigma^2 \bar{\sigma} + \left\langle \frac{dU}{d\sigma} \right\rangle - 2m^* g_\sigma \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} \left(1 + \frac{2g_\pi^2 \bar{\pi}^2 \bar{k}^2}{\Delta^2} \right) + \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} \left(1 - \frac{2g_\pi^2 \bar{\pi}^2 \bar{k}^2}{\Delta^2} \right) \right\}, \quad (5.7)$$

$$0 = \bar{\pi} \left\{ m_\pi^2 + \bar{k}^2 + 2g_\pi^2 \bar{k}^2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \left[\frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} \left(1 + 2 \frac{m^{*2} + p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) + \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} \left(1 - 2 \frac{m^{*2} + p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) \right] \right\}, \quad (5.8)$$

$$\bar{\omega}_0 = (g_\omega / m_\omega^2) \varrho. \quad (5.9)$$

Az (5.7)–(5.9) egyenletekben bevezettük a kvázinukleon-állapotok betöltési valószínűségét (l. B. Függelék):

$$n_\lambda(\vec{p}) = \{1 + e^{[E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]/T}\}^{-1}, \quad (5.10a)$$

$$\bar{n}_\lambda(\vec{p}) = \{1 + e^{-[E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]/T}\}^{-1}. \quad (5.10b)$$

Az (5.7) és (5.8) szelf-konzisztens egyenletek megoldása szolgáltatja a $\bar{\sigma}$ és $\bar{\pi}$ amplitúdókat (adott T és μ esetén). Az (5.9) összefüggés szerint az $\bar{\omega}_0$ vektormezon-teret a

q barionsűrűség határozza meg,

$$q = \langle : \bar{\psi} \gamma^0 \psi : \rangle = 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} (n_+ + n_- - \bar{n}_+ - \bar{n}_-). \quad (5.11)$$

Az (5.7)–(5.11) kifejezésekben a $\lambda \equiv (s, t = \pm 1)$ indexet a \pm indexszel cseréltük föl az egyszerűség kedvéért.

Az (5.8) egyenletnek mindig létezik a normál fázisnak megfelelő, triviális $\bar{\pi} = 0$ megoldása, azonban létezhet nem triviális $\bar{\pi} \neq 0$ megoldása is, amely a pion-kondenzált fázist jellemzi.

Most rátérünk annak belátására, hogy az (5.7)–(5.9) egyenletek, amelyek a mezonterek amplitúdóinak meghatározására szolgálnak, a rendszer termodinamikai egyensúlyának szükséges feltételei adott T és μ esetén.

Az (5.1)–(5.4) összefüggéseket felhasználva

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr } e^{-\beta K} = e^{-\beta V \in} \prod_{\vec{p}, \lambda} \left(\sum_{n=0,1} e^{-\beta(E_\lambda^{(+)} - \mu)n} \right) \left(\sum_{n=0,1} e^{\beta(E_\lambda^{(-)} - \mu)\bar{n}} \right) = \\ &= e^{-\beta V \in} \prod_{\vec{p}, \lambda} (1 + e^{-\beta[E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]}) (1 + e^{\beta[E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]}) \end{aligned} \quad (5.12)$$

adódik, és a rendszer termodinamikai potenciálja

$$\begin{aligned} \Omega(V, T, \mu; \bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0, |\vec{k}|) &= V \in (\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) - \\ - T \sum_{\vec{p}, \lambda} \{ \ln(1 + e^{-\beta[E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]}) + \ln(1 + e^{\beta[E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]}) \}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Rögzített T és μ esetén a termodinamikai potenciál extrémumát keresve a termodinamikai egyensúly szükséges feltételeihez jutunk:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\sigma}} = 0, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\pi}} = 0, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial \bar{\omega}_0} = 0, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial |\vec{k}|} = 0. \quad (5.14)$$

Az (5.14) feltételek közül az első három megegyezik a téregyenletekből nyert (5.7)–(5.9) szelf-konzisztens egyenletekkel. A negyedik feltétel további szelf-konzisztens egyenletet jelent,

$$\begin{aligned} \vec{k}^2 \bar{\pi}^2 &= -\frac{1}{2} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} [(1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2) \vec{k}^2 + 2\Delta^2] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} [(1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2) \vec{k}^2 - 2\Delta^2] \right\}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

amelynek segítségével a $|\vec{k}|$ hullámszám is meghatározható termodinamikai egyensúly esetén.

A szelf-konzisztens egyenletekben szereplő többszörös integrálok egyszeres integrálokká alakíthatók át (C. Függelék), ami nagy mértékben megkönnyíti az egyenletek numerikus megoldását.

6. A rendszert jellemző fizikai mennyiségek

A rendszert jellemző fizikai mennyiségek közvetlenül kiszámíthatók a (B.8) összefüggés alapján a megfelelő spurok ismeretében. Másrészt bizonyos termodinamikai jellemzők, mint pl. a rendszer entrópiasűrűsége, energiasűrűsége stb. a termodinamikai potenciál (5.13) képletéből is lezármasztathatók ismert termodinamikai összefüggések alapján:

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \Omega}{\partial T} &= 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_{t=\pm 1} \{ \ln(1 + e^{-(E_t - v)/T}) + \ln(1 + e^{-(E_t + v)/T}) \} + \\ &+ \frac{2}{T} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_{t=\pm 1} \{ n_t(E_t - v) + \bar{n}_t(E_t + v) \}, \end{aligned} \quad (6.1)$$

$$\mathcal{E} = \frac{\Omega}{V} + T\mathcal{S} + \mu\varrho = 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \sum_{t=\pm 1} (n_t + \bar{n}_t) E_t + g_\omega \bar{\omega}_0 \varrho + \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0). \quad (6.2)$$

Mivel más mennyiségekre is szükségünk van, az elsőként említett utat követjük.

Határozzuk meg először a (3.13) energiainpulzus-tenzor várható értékét. Kvázinukleontérre térve át azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} T_{MF}^{00} &= \frac{i}{2} : (\bar{\psi}_v \gamma^0 \psi_v^{;0} - \bar{\psi}_v^{;0} \gamma^0 \psi_v) : - g_\omega \bar{\omega}_0 : \bar{\psi}_v \gamma^0 \psi_v : + \\ &+ \frac{1}{2} m_\sigma^2 \bar{\sigma}^2 + U(\bar{\sigma}) + \frac{1}{2} m_\omega^2 \bar{\omega}_0^2 + \frac{1}{2} (m_\pi^2 + \vec{k}^2) \bar{\pi}^2, \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} T_{MF}^{0\alpha} = T_{MF}^{\alpha 0} &= \frac{i}{4} \{ : (\bar{\psi}_v \gamma^\alpha \psi_v^{;0} - \bar{\psi}_v^{;0} \gamma^\alpha \psi_v) : + : (\bar{\psi}_v \gamma^0 \psi_v^{;\alpha} - \bar{\psi}_v^{;\alpha} \gamma^0 \psi_v) : \} - \\ - \frac{k^\alpha}{4} : \bar{\psi}_v \gamma^0 \tau_3 \psi_v : &- \frac{1}{2} g_\omega \bar{\omega}_0 : \bar{\psi}_v \gamma^\alpha \psi_v : - \frac{g_\pi \bar{\pi}}{4\sqrt{2}} k^\beta : \bar{\psi}_v \gamma_5 \gamma^0 (\gamma^\beta \gamma^\alpha - \gamma^\alpha \gamma^\beta) (\tau_1 - \tau_2) \psi_v :, \end{aligned} \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} T_{MF}^{\alpha\beta} = T_{MF}^{\beta\alpha} &= \frac{i}{4} \{ : (\bar{\psi}_v \gamma^\beta \psi_v^{;\alpha} - \bar{\psi}_v^{;\alpha} \gamma^\beta \psi_v) : + : (\bar{\psi}_v \gamma^\alpha \psi_v^{;\beta} - \bar{\psi}_v^{;\beta} \gamma^\alpha \psi_v) : \} + \\ &+ \bar{\pi}^2 k^\alpha k^\beta + g^{\alpha\beta} \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) - \frac{1}{4} : \bar{\psi}_v (\gamma^\beta k^\alpha + \gamma^\alpha k^\beta) \tau_3 \psi_v : - \\ - \frac{1}{2} g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} : \bar{\psi}_v \gamma_5 |\vec{k}| (g^{\alpha 3} \gamma^\beta + g^{\beta 3} \gamma^\alpha) (\tau_1 - \tau_2) \psi_v :, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, 3). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Elvégezve a makrokanonikus sokaság szerinti átlagolást, a következő eredményt kapjuk:

a) Az energiasűrűség

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \langle T_{MF}^{00} \rangle &= 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \{ (n_+ + \bar{n}_+) E_+ + (n_- + \bar{n}_-) E_- \} + \\ &+ \frac{1}{2} m_\sigma^2 \bar{\sigma}^2 + U(\bar{\sigma}) + \frac{1}{2} m_\omega^2 \bar{\omega}_0^2 + \frac{1}{2} (m_\pi^2 + \vec{k}^2) \bar{\pi}^2, \end{aligned} \quad (6.6)$$

ami (5.9) figyelembevételével pontosan megegyezik korábbi (6.2) eredményünkkel.

b) Az energiaáram-sűrűség, az impulzussűrűség, valamint a mechanikai nyírófeszültségek eltűnnek,

$$\langle T_{MF}^{0\alpha} \rangle = \langle T_{MF}^{\alpha 0} \rangle = 0, \quad \langle T_{MF}^{\alpha\beta} \rangle = 0 \quad (\alpha \neq \beta, \alpha, \beta = 1, 2, 3). \quad (6.7)$$

c) A mechanikai feszültségtenzor diagonális elemei:

$$\begin{aligned} \sigma_\perp = \sigma_{11} = \sigma_{22} &= \langle T_{MF}^{11} \rangle = \langle T_{MF}^{22} \rangle = \\ &= 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2} \vec{p}_\perp^2 \left(\frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} + \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} \right) - \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0), \quad (6.8) \\ \sigma_\parallel = \sigma_{33} &= \langle T_{MF}^{33} \rangle = \bar{\pi}^2 \vec{k}^2 - \epsilon(\bar{\sigma}, \bar{\pi}, \bar{\omega}_0) + \\ &+ 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \left\{ \left[p_\parallel^2 \left(1 + \vec{k}^2 \frac{1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2}{2\Delta^2} \right) + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{2p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) \vec{k}^2 + \right. \right. \\ &+ g_\pi^2 \bar{\pi}^2 \vec{k}^2 \left(1 + 2 \frac{m^{*2} + p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) \left. \right] \frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} + \left[p_\parallel^2 \left(1 - \vec{k}^2 \frac{1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2}{2\Delta^2} \right) + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{4} \left(1 - \frac{2p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) \vec{k}^2 + g_\pi^2 \bar{\pi}^2 \vec{k}^2 \left(1 - 2 \frac{m^{*2} + p_\parallel^2}{\Delta^2} \right) \right] \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} \right\}. \quad (6.9) \end{aligned}$$

A pion-kondenzált fázis spin-izospinszerkezetét jól jellemzi a

$$\varrho_{si, \pm}^{(\alpha)} = \left\langle : \bar{\psi} \gamma^0 \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_5 \gamma_3 \tau_\alpha) \psi : \right\rangle \quad (6.10)$$

spin-izospinsűrűség. Nem relativisztikus határesetben a

$$\Lambda_\pm^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \gamma^0 (1 \pm \gamma_5 \gamma_3 \tau_\alpha) \rightarrow \frac{1 \pm \sigma_3 \tau_\alpha}{2} \quad (6.11)$$

olyan projektor-operátorok, hogy $\Lambda_+^{(\alpha)}$ a \vec{k} vektor irányához képest felfelé (lefelé) álló spinű és az α -adik izospintérbeni irányhoz képest felfelé (lefelé) álló izospinű ($\uparrow + \uparrow$) nukleon-állapotokra vetít, míg $\Lambda_-^{(\alpha)}$ a felfelé (lefelé) álló spinű és lefelé (felfelé) álló izospinű ($\uparrow + \downarrow$) nukleon-állapotokra vetít. Az izospintérben az $\alpha=1, 2$ és 3 irányokat rendre az \vec{u} , $\vec{v} \times \vec{u}$ és \vec{v} vektorok jelölik ki. Térjünk át (6.10)-ben kvázinukleon-térre, akkor

$$\varrho_{si, \pm}^{(\alpha)} = \left\langle : \bar{\psi}_v \gamma^0 \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_5 \gamma_3 R^\pm \tau_\alpha R) \psi_v : \right\rangle. \quad (6.12)$$

A makrokanonikus átlagolás elvégzése után azt kapjuk, hogy

$$\varrho_{\text{si}, \pm}^{(1)} = \varrho/2 \mp \varrho_{\text{si}, 0} (\sin \vec{k}\vec{x} + \cos \vec{k}\vec{x})/2\sqrt{2}, \quad (6.13a)$$

$$\varrho_{\text{si}, \pm}^{(2)} = \varrho/2 \mp \varrho_{\text{si}, 0} (\sin \vec{k}\vec{x} - \cos \vec{k}\vec{x})/2\sqrt{2}, \quad (6.13b)$$

$$\varrho_{\text{si}, \pm}^{(3)} = \varrho/2, \quad (6.13c)$$

ahol

$$\varrho_{\text{si}, 0} = 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{2g_\pi \bar{\pi} m^* |\vec{k}|}{A^2} (n_+ - n_- - \bar{n}_+ + \bar{n}_-). \quad (6.14)$$

A kondenzált fázisban $2\pi/|\vec{k}|$ térbeli periódussal változó piontér a nukleonok számára periódikus átlagpotenciált hoz létre, amelyben azok a (6.13) szerinti periodikus spin-izospinszerkezetet veszik fel, azaz „spin-izospin-kristály” jön létre. A spin-izospinsűrűség periódikus részének amplitúdója arányos a piontér amplitúdójával, és (6.14)-ből látható, hogy azért nem zérus, mert az eredetileg négyszeresen elfajult egynukleon-energianívók két-két kétszeresen elfajult nívóra hasadnak fel a pion-kondenzált maganyagban, s így $n_+ \neq n_-$, ill. $\bar{n}_+ \neq \bar{n}_-$.

7. A modell paraméterei

A (2.1)–(2.3) Lagrange-sűrűség az $m_\sigma, m_\pi, m_\omega$ mezontömegeket, a mezonterek $g_\sigma, g_\pi, g_\omega$ csatolási állandóit és a σ tér önkölcsönhatásának erősségét meghatározó b és c együttthatókat tartalmazza paraméterekként.

Áttérve dimenziótlan mennyiségekre,

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} \rightarrow s &= \frac{m_\sigma \bar{\sigma}}{m^2}, & g_\sigma \rightarrow g_s &= \frac{g_\sigma m}{m_\sigma}, \\ \bar{\omega}_0 \rightarrow \vartheta &= \frac{m_\omega \bar{\omega}_0}{m^2}, & g_\omega \rightarrow g_\vartheta &= \frac{g_\omega m}{m_\omega}, \\ \bar{\pi} \rightarrow \bar{\pi}/m, & & g_\pi \rightarrow g_\pi m, \end{aligned} \quad (7.1)$$

könnyen beláthatjuk, hogy a modell független paraméterként csak a $g_s, g_\vartheta, b, c, g_\pi$ és m_π mennyiségeket tartalmazza.

Modellünkötől megköveteljük, hogy helyesen írja le normál állapotban abszolút zérus fokon az izotrop szimmetrikus maganyag viselkedését a termodinamikai egyensúly állapotában, amelyet

$$\begin{aligned} B/A &= \mathcal{E}/\varrho - m = -15,96 \text{ MeV} && \text{kötési energia/nukleon,} \\ \varrho_0 &= 0,145 \text{ fm}^{-3} && \text{sűrűség,} \\ \text{és } \kappa &= 9\varrho_0^2 \frac{\partial^2 (B/A)}{\partial \varrho^2} = 280 \text{ MeV} && \text{kompresszibilitás} \end{aligned}$$

jellemez. Ezek a megszorítások lehetővé teszik a g_s, g_ϑ, b és c paraméterek illesztését. [4] szerzői ily módon több paraméter-négyest határoztak meg és vettek vizsgálat alá.

Kimutatták, hogy g_π realisztikus értékei esetén az (5.8) egyenletnek csak akkor létezik nem triviális megoldása, ha a g_s , g_ρ , b és c paramétereket úgy választjuk meg, hogy m^* ne változzon számottevően a sűrűség függvényében:

$$g_s = 6, \quad g_\rho = 4,7, \quad b = -0,734, \quad c = 6,89.$$

A piontér csatolási állandójának a szabad πNN csatolási állandó ($g_\pi = 1,41$ fm) helyett olyan effektív értéket kell választani, amely figyelembe veszi a nukleonok közti rövidhatótávolságú korrelációkat, a Δ -rezonanciákat és a kölcsönható részecskék (N, Δ) véges méretét (alakfaktorát). Az effektív pion-csatolási állandót azonban nem lehet a normál maganyag tulajdonságai alapján meghatározni. Elméleti megfontolások szerint [4] az effektív csatolási állandó nem függ számottevően a nukleonsűrűsegtől és értéke $g_\pi \approx 1$ fm.

Az anizotrop normálfázis modellezésére bevezetjük az α paramétert úgy, hogy az n_λ és \bar{n}_λ betöltési valószínűségekből a $p_\parallel \rightarrow \alpha p_\parallel$ helyettesítést végezzük el. $0 < \alpha < 1$ esetén az így kapott betöltési valószínűségek a \vec{z}^0 irányában megnyúlt, ellipszoidális Fermi-felületnek felelnek meg. Így tudjuk modellezni „két” egymással szemben áramló maganyag anizotrop impulzuseloszlását. Az $\alpha > 1$ értékek a \vec{z}^0 irányban összehúzó, „diszkosz” alakú Fermi-felületnek felelnek meg; a \vec{z}^0 irányt a nehézion-reakcióban az ütköző atommagok impulzusainak iránya jelöli ki.

8. A pion-kondenzált fázis anizotrópiája

A pion-kondenzált fázis anizotrópiáját jellemezhetjük a

$$\delta = \frac{2\sigma_\perp}{\sigma_\perp + \sigma_\parallel} \quad (8.1)$$

paraméterrel. Ha a feszültség a \vec{k} irányban nagyobb, azaz ha $\sigma_\parallel > \sigma_\perp$, akkor $\delta < 1$. Természetesen hasonlóan jellemezhetjük δ -val a normál fázis anizotrópiájának mértékét is.

Számítsuk ki termodinamikai egyensúly esetén (rögzített T és μ értékek mellett) a longitudinális és transzverzális feszültségkomponensek különbségét. A (6.8), (6.9) és (5.15) összefüggéseket felhasználva kapjuk, hogy

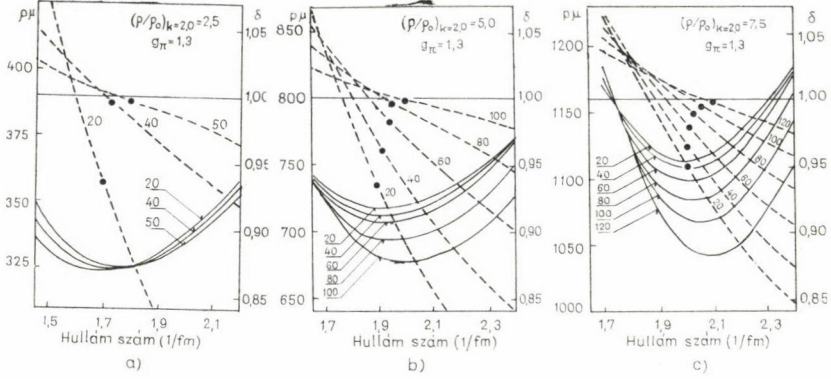
$$\begin{aligned} \Delta\sigma = \sigma_\parallel - \sigma_\perp = 2 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{n_+ + \bar{n}_+}{E_+} \left[p_\parallel^2 \left(1 + (1 + 4g_\pi^2 \pi^2) \frac{\vec{k}^2}{2A^2} \right) - \frac{p_\perp^2}{2} \right] + \right. \\ \left. + \frac{n_- + \bar{n}_-}{E_-} \left[p_\parallel^2 \left(1 + (1 + 4g_\pi^2 \pi^2) \frac{\vec{k}^2}{2A^2} \right) - \frac{p_\perp^2}{2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

A C. Függelékben leírt integráltranszformáció segítségével könnyen belátható, hogy

$$\Delta\sigma = 0 \quad (8.3)$$

tetszőleges T és μ esetén. Mivel (5.15) és így (8.2) és (8.3) is csak termodinamikai egyensúly esetén érvényes, így beláttuk, hogy a pion-kondenzált fázis anizotrópiája termodinamikai egyensúlyi állapotban tetszőleges rögzített T és μ esetén eltűnik. Ha a rendszer nincsen termodinamikai egyensúlyi állapotban, akkor az anizotrópia tetszőleges lehet.

Ha az (5.8) egyenlet megoldása $\bar{\pi}=0$ rögzített $\bar{k} \neq 0$ esetén, akkor nemcsak a spin-izospinsűrűség periodikus változása szűnik meg a térben ((6.14) jobb oldala zérus), hanem az anizotrópia is, azaz $\sigma_{\perp} = \sigma_{\parallel}$ lesz. Könnyű belátni, hogy a rendszer ilyenkor pontosan olyan, mint a normál fázisban. (Ehhez csak a fizikai mennyiségek kifejezéseiben szereplő integrálokat kell p_{\perp} és $p_{\parallel} \pm \frac{|\bar{k}|}{2}$ változók szerinti integrálokká transzformálni.)



1. ábra. A pion-kondenzált fázis $g = \mu Q$ szabadentalpia sűrűsége MeV/fm³ egységekben és δ anizotrópiája a hullámszám függvényében. A négyzetek a szabadentalpia minimumához tartozó anizotrópia értékeket jelölik

Az 1. ábrán a pion-kondenzált fázis $g = \mu Q$ szabadentalpia-sűrűségét ábrázoltuk $|\bar{k}|$ függvényében. A δ anizotrópiaparamétert szintén feltüntettük az ábrán, és négyzetek jelölik a szabadentalpia-sűrűség minimumához tartozó δ -értékeket. Látjuk, hogy $T \gtrsim 100$ MeV hőmérsékleten a szabadentalpia-sűrűség minimumához tartozó anizotrópia gyakorlatilag eltűnik, míg $T < 100$ MeV esetén minél alacsonyabb a hőmérséklet, annál nagyobb a szabadentalpia-sűrűség minimumához tartozó anizotrópia.

A sűrűség és/vagy a hőmérséklet növelésével a szabadentalpia-sűrűség minimuma a nagyobb $|\bar{k}|$ -értékek felé tolódik.

Arra következtethetünk, legalábbis átlagtér-közelítésben, hogy a pion-kondenzált maganyag $T \lesssim 100$ MeV hőmérsékleten anizotrop és a $\sigma_{\parallel} > \sigma_{\perp}$ egyenlőtlenség áll fenn a szabadentalpia-sűrűség minimumának közelében. Ne feledjük, hogy rögzített hőmérséklet és adott külső mechanikai feszültségek esetén a szabadentalpia minimuma határozza meg a rendszer termodinamikai egyensúlyát.

9. A normál és a pion-kondenzált fázis egyensúlyának feltételei

A maganyag két fázisának egyensúlyát a

$$T_{\text{norm}} = T_{\text{kond}}, \quad (9.1)$$

$$\mu_{\text{norm}} = \mu_{\text{kond}}, \quad (9.2)$$

$$(\sigma_{\perp})_{\text{norm}} = (\sigma_{\perp})_{\text{kond}}, \quad (9.3)$$

$$(\sigma_{\parallel})_{\text{norm}} = (\sigma_{\parallel})_{\text{kond}} \quad (9.4)$$

feltételek szabják meg. A (9.3) és (9.4) feltételek a két fázis mechanikai egyensúlyát biztosítják, ha nincsenek nyírófeszültségek.

Tekintve, hogy a téregyenletek olyan megoldásaival foglalkozunk, amelyek végtelen, egyfázisú maganyagnak felelnek meg, ezért a fázisátalakulást csak bizonyos megszorításokkal vizsgálhatjuk. Tegyük fel, hogy adott hőmérsékleten, adott mechanikai feszültségek alkalmazásával létrehozuk az anizotrop normál fázist. Most megkérdezhetjük, hogy a maganyag az alkalmazott mechanikai „prés” alatt át tud-e alakulni pion-kondenzált fázisúvá, azaz, hogy létezik-e olyan kondenzált állapot, amelyre a (9.1)—(9.4) feltételek teljesülnek.

A (9.3) és (9.4) feltételt a fázisdiagram megszerkesztéséhez

$$P_{\text{norm}} = P_{\text{kond}}, \quad (9.5)$$

$$\delta_{\text{norm}} = \delta_{\text{kond}} \quad (9.6)$$

alakba írtuk át, ahol P az átlagos nyomás,

$$P = \frac{2\sigma_{\perp} + \sigma_{\parallel}}{3} \quad (9.7)$$

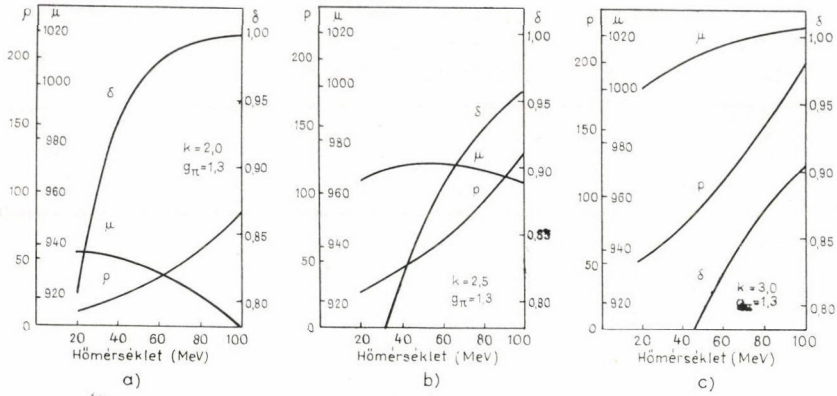
és δ a (8.1) összefüggéssel definiált anizotropia-paraméter.

A fázisegyensúly keresése a következő eljárással történt:

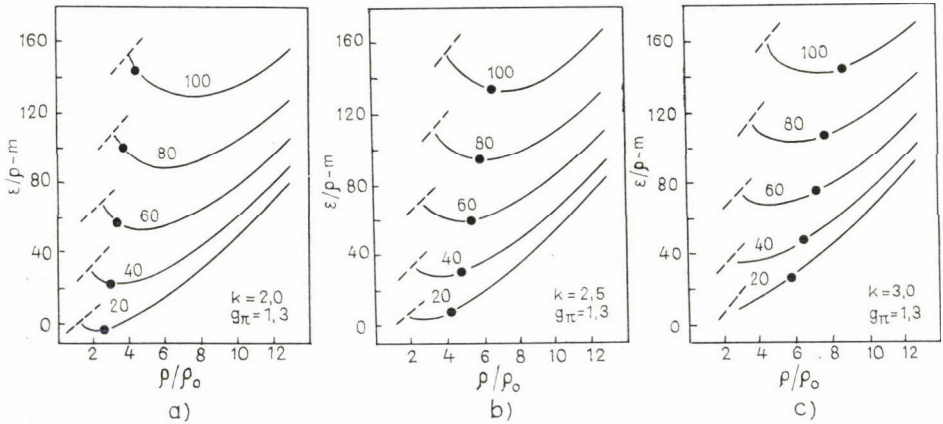
- a) Pion-kondenzált fázis:
 - a1) rögzítjük a T_{kond} hőmérsékletet és a μ_{kond} kémiai potenciált,
 - a2) oldjuk meg az (5.7)—(5.9) szelf-konzisztens egyenleteket,
 - a3) számítsuk ki a P_{kond} nyomást és a δ_{kond} anizotropiaparamétert.
- b) Anizotrop normál fázis:
 - b1) válasszuk meg a T_{norm} hőmérsékletet és a μ_{norm} kémiai potenciált a (9.1) és (9.2) fázisegyensúlyi feltételekkel összhangban.
 - b2) válasszunk egy α paraméter-értéket az impulzuseloszlás anizotropiájának leírására,
 - b3) oldjuk meg az (5.7) és (5.9) egyenleteket $\bar{\pi}=0$ mellett a $\bar{\sigma}$ és $\bar{\omega}_0$ mezontér-amplitúdókra,
 - b4) számoljuk ki a P_{norm} nyomást és a δ_{norm} anizotropiaparamétert,
 - b5) ismételjük a szelf-konzisztens egyenletek megoldását az α paramétert mindaddig változtatva, míg a (9.6) feltétel nem teljesül,
 - b6) ha a (9.5) egyenlőség is teljesül, akkor megtaláltuk a fázisegyensúlyt,
 - b7) ha a (9.5) nem teljesül, akkor rögzített hőmérsékleten változtassuk μ_{kond} értékét addig, míg az egyensúlyi feltételek nem teljesülnek.

A 2. ábrán a fázisegyensúlyhoz tartozó μ kémiai potenciált, P nyomást és δ anizotropia-paramétert ábrázoltuk a T hőmérséklet függvényében a $|\vec{k}|$ hullámszám különböző értékei esetén. Látható, hogy a fázisegyensúly erősen függ $|\vec{k}|$ értékétől. Fázisegyensúly esetén a két fázis sűrűsége és energiasűrűsége erősen különbözik egymástól: a normál fázis sűrűsége sokkal kisebb, energiasűrűsége pedig jóval nagyobb a pion-kondenzált fázisénál.

A (P, T) -diagramon a fázisegyensúlyi görbe alatti tartomány a normál fázisnak, a görbe fölötti tartomány pedig a pion-kondenzált fázisnak felel meg. Vegyük észre, hogy izobár folyamatban a hőmérséklet kellő növelésével a pion-kondenzált rendszer normál rendszerré alakulhat át, miközben szimmetriáinak száma nő. Hasonlóképpen



2. ábra. A maganyag fázis diagramja. Az anizotrop, normál fázis és a pion-kondenzált fázis közötti egyensúly esetén tapasztalható P nyomás, δ anizotrópia és μ kémiai potenciál a T hőmérséklet függvényében, a hullámszám $k = 2.0, 2.5, 3.0$ értéknél



3. ábra. A pion-kondenzált fázisban az egy nukleonra eső kötési energia MeV egységekben, mint a q/q_0 relatív sűrűség függvénye, a hőmérséklet $T = 20, 40, 60, 80, 100$ MeV-es, és a hullámszám: $k = 2.0, 2.5, 3.0$ értékei mellett. Az alapállapotú normál maganyag sűrűsége q_0 . A szaggatott vonal a normál fázisban mérhető kötési energiát ábrázolja

a szilárdtest — folyadék fázisátalakulás esetén is a több szimmetriával rendelkező folyadék-fázis adott nyomás esetén magasabb hőmérsékleteken valósul meg, mint a kevesebb szimmetriával bíró szilárd fázis.

A 3. ábrán az $E/p-m$ egy nukleonra eső kötési energiát tüntettük föl mint a q/q_0 relatív sűrűség és a T hőmérséklet függvényét. Látható, hogy az egy nukleonra eső kötési energia értéke fázisegyensúly esetén erősen függ $|\vec{k}|$ -től a pion-kondenzált fázisban. Amíg az izotrop normál fázis energiája a q/q_0 relatív sűrűséggel monoton nő, addig a pion-kondenzált fázis esetén az egy nukleonra jutó kötési energiának határozott minimuma van.

A fázisátalakulás során felszabaduló energia, azaz az egy nukleonra jutó szabadenergia megváltozása

$$\Delta F/A = (-P/\varrho + \mu)_{\text{norm}} - (-P/\varrho + \mu)_{\text{kond}} \quad (9.8)$$

van ábrázolva a 4. ábrán az átalakulási hőmérséklet függvényében különböző $|\vec{k}|$ értékek esetén. Érdekes felfigyelní arra, hogy a szabadenergia-változásnak maximuma lehet.

10. Összegzés

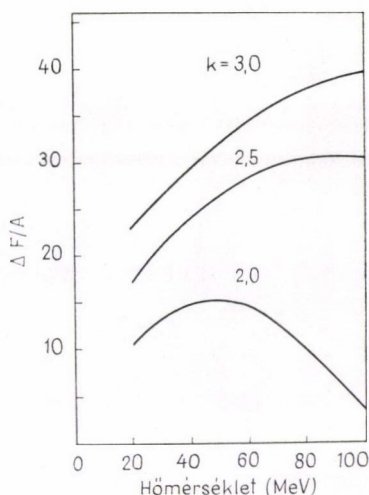
A maganyag (2.1)–(2.3) Lagrange-sűrűségéből levezettük a téregyenleteket és az energiaimpulzus-tenzort. A téregyenletek átlagtér-közelítésben egzaktul megoldhatók. A megoldásoknak két osztályát vizsgáltuk: a pion-kondenzált fázist és az anizotrop normál fázist leíró megoldásokat. A töltésinvarianciát spontán sértő pion-kondenzált fázisban a piontér a \vec{k} hullámvektorral jellemzett makroszkopikus térbeli oszcillációt mutat, és ez ugyanilyen periódusú oszcillációt hoz létre a nukleonok spin-izospinsűrűségében.

A pion-kondenzált fázis termodinamikai egyensúlyi állapotban (az abszolút hőmérséklet és a kémiai potenciál rögzített értéke mellett) izotropnak bizonyult.

A nem termodinamikai egyensúlyi állapotban található pion-kondenzált fázist a szabadentalpia-sűrűség minimumának környezetében egynél kisebb anizotrópia-paraméter ($\delta < 1$) jellemzi. Ugyanilyen jellegű anizotrópiával rendelkezik a nehézion-ütközésekben az egymásba hatoló atommagok anyaga, ami anizotrop normál fázisú maganyag.

Vizsgáltuk a pion-kondenzált és az anizotrop normál fázis egyensúlyának felteteleit. A fázisdiagram (2. ábra) mutatja, hogy a fázisegyensúly megvalósulhat a reális $\delta < 1$ értékeknél. Így arra következtethetünk, hogy az anizotrópia nem akadályozza az anizotrop normál fázisból a pion-kondenzált fázisba történő átalakulásnak, miközben a pion-kondenzátumot jellemző \vec{k} hullámvektor az ütköző magok impulzusai által kitüntetett irányba áll be.

Fel lehet hozni néhány komoly érvt eredményeinkkel szemben. Ezek egyike a következő. A nehézion-reakcióban keletkező magfizikai rendszer messze nincsen termodinamikai egyensúlyban. Az ütközés kezdetén a hőmérséklet alacsony és az anizotrópia maximális, majd a hőmérséklet gyorsan nő és az anizotrópia lecsökken az ütközés folyamatában. Ezért az időtől független stacionárius tárgyalás nem lehet helyes. Való igaz, hogy a kapott eredmények legfeljebb csak az első lépést jelenthetik a nehézion-reakciók dinamikai leírását szolgáló időfüggő tárgyalás felé [6]. Mégis érdemes megemlíteni, hogy pion-kondenzált fázisban a szabadentalpia-sűrűség minimumához alacsonyabb hőmérsékleten erősebb anizotrópia tartozik mint magasabb hőmérsékleten. A nehézion-reakciókban szintén az alacsonyabb hőmérséklet jár



4. ábra. A pion-kondenzáció során, nukleononként felszabaduló szabadenergia MeV egységeiben, a T hőmérséklet függvényében ábrázolva

együtt erősebb anizotrópiával. Ez a hasonlóság arra engedhet következtetni, hogy a pion-kondenzáció szerepet játszhat a nehézion-reakció lefolyásában.

Másik ellenérv lehet eredményeinkkel szemben az átlagtér-közelítés alkalmazása, amely elhanyagolja a nukleonkorrelációkat és a kicserélődési effektusokat. Az átlagtér-közelítésnek ez a hiányossága várhatóan kevésbé befolyásolja a fázisegyensúly feltételeinek vizsgálatát, hiszen mindkét fázis jellemzőit ugyanabban a közelítésben számoljuk.

A. Függelék. Az energiaimpulzus-tenzor szimmetrizálása

A szimmetrizálást a következőképpen végezzük el [7]: Mint ismeretes, ha az energiaimpulzus-tenzorhoz hozzáadjuk egy tetszőleges, két indexében antiszimmetrikus

$$f^{n(sm)} = -f^{n(ms)} \quad (\text{A.1})$$

harmadrendű tenzor $f^{n(sm)}_{;s}$ divergenciáját, akkor a rendszer energiája és impulzusa nem változik meg. Az új energiaimpulzus-tenzor

$$T'^{nm} = T^{nm} + \frac{\partial f^{n(sm)}}{\partial x^s}. \quad (\text{A.2})$$

Válasszuk meg $f^{n(sm)}$ -et úgy, hogy $T'^{nm} = T'^{mn}$ legyen. Belátható, hogy az impulzusmomentum tenzora

$$M^{n(rs)} = M_0^{n(rs)} + S^{n(rs)}, \quad (\text{A.3})$$

ahol

$$M_0^{n(rs)} = x^s T^{rn} - x^r T^{sn} \quad (\text{A.4})$$

a rendszer pályamomentum-tenzora és $S^{n(rs)}$ a spin-tenzor. Az energiaimpulzus-tenzor szimmetrikus volta a pályamomentum megmaradásának szükséges és elégséges feltétele, ezért $f^{n(sm)}$ -et úgy kell megválasztani, hogy

$$M_0'^{n(rs)}_{;n} = 0 \quad (\text{A.5})$$

legyen. Másrészt a teljes impulzusmomentumra megmaradási tétel érvényes:

$$M^{n(rs)}_{;n} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Az (A.5) és (A.6) egyenletek azt jelentik, hogy $M_0'^{n(rs)}$ és $M^{n(rs)}$ csak egy tetszőleges, két-két indexében antiszimmetrikus negyedrendű tenzor divergenciájában különbözhet:

$$M_0'^{n(rs)} = M^{n(rs)} + g^{(nt)(rs)}_{;t}. \quad (\text{A.7})$$

Behelyettesítjük az (A.7) egyenletbe az (A.3) és (A.4) összefüggéseket. Azonos átalakítás után a

$$\frac{\partial}{\partial x^t} (f^{r(tn)} x^s - f^{s(tn)} x^r) - (f^{r(sn)} - f^{s(rn)}) = S^{n(rs)} + \frac{\partial}{\partial x^t} g^{(nt)(rs)} \quad (\text{A.8})$$

összefüggéshez jutunk. Válasszuk a tetszőleges $g^{(nt)(rs)}$ tenzort

$$g^{(nt)(rs)} = f^{r(tn)} x^s - f^{s(tn)} x^r \quad (\text{A.9})$$

alakúnak. Ekkor a keresett $f^{n(rm)}$ tenzornak az

$$f^{r(ns)} - f^{s(nr)} = S^{n(rs)} \quad (\text{A.10})$$

feltételt kell kielégítenie.

Határozzuk meg a (2.1)–(2.3) Lagrange-sűrűséghez tartozó spin-tenzort. Definíció szerint

$$S^{n(rs)} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \omega_{l;n}} A_l^{t(rs)} \omega_t - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi_{;n}} A_\psi^{(rs)} \psi - \bar{\psi} A_\psi^{(rs)} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \bar{\psi}_{;n}}, \quad (\text{A.11})$$

ahol

$$A_l^{t(rs)} = \delta_l^r g^{ts} - \delta_l^s g^{tr}, \quad A_\psi^{(rs)} = \frac{i}{2} \sigma^{rs}, \quad A_\psi^{(rs)} = -\frac{i}{2} \sigma^{rs}, \quad (\text{A.12})$$

$$\sigma^{rs} = \frac{i}{2} (\gamma^r \gamma^s - \gamma^s \gamma^r). \quad (\text{A.13})$$

Az (A.12) mátrixok adják meg a vektortér, ill. a spinortér transzformációját infinitezimális téridő-forgatások esetén. A Lagrange-sűrűség kifejezését behelyettesítve (A.11)-be azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} S^{s(nm)} &= -\frac{1}{4} \bar{\psi} (\gamma^s \sigma^{nm} + \sigma^{nm} \gamma^s) \psi + (\omega^{s;r} - \omega^{r;s}) (\delta_r^m g^{tn} - \delta_r^n g^{tm}) \omega_t = \\ &= -\frac{i}{8} \bar{\psi} [(\gamma^s \gamma^n \gamma^m - \gamma^m \gamma^n \gamma^s) - (\gamma^s \gamma^m \gamma^n - \gamma^n \gamma^m \gamma^s)] \psi + \\ &+ (\omega^{s;n} - \omega^{n;s}) \omega^m - (\omega^{s;m} - \omega^{m;s}) \omega^n. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Behelyettesítjük (A.14)-et az (A.10) egyenletbe. Az (A.10) egyenlet egy lehetséges megoldását könnyen leolvashatjuk:

$$f^{n(sm)} = -\frac{i}{8} \bar{\psi} (\gamma^s \gamma^n \gamma^m - \gamma^m \gamma^n \gamma^s) \psi - (\omega^{s;m} - \omega^{m;s}) \omega^n = -f^{n(ms)}. \quad (\text{A.15})$$

Ezt a tenzort írva (A.2)-be, az új energiainpulzus-tenzor már a szimmetrikus (2.11) alakot ölti. Erről könnyen meggyőződhetünk a (2.6) egyenletnek és a $\bar{\psi}$ -ra vonatkozó

$$\bar{\psi} (i\gamma^s \tilde{\partial}_s + m - g_\sigma \sigma + g_\omega \gamma^s \omega_s + g_\pi \vec{\pi}_s \gamma_5 \gamma^s \vec{\tau}) = 0 \quad (\text{A.16})$$

egyenletnek a felhasználásával.

B. Függelék. A véges hőmérsékletű rendszer egyrészcseke-operátorainak makrokanonikus várható értéke

Az egyrészcseke-operátorok várható értéke mindig

$$j = \langle : \bar{\psi}_v \Gamma \psi_v : \rangle = \left\langle : \bar{\psi}_v(x) \Gamma \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \psi_v(x) : \right\rangle \quad (\text{B.1})$$

alakú a számunkra érdekes esetekben, ahol

$$\Gamma \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) = -\vec{\Gamma}_1(x) i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} + \Gamma_0(x) \quad (\text{B.2})$$

és $\Gamma_0(x)$, ill. $\vec{\Gamma}_1(x)$ a γ^n Dirac-mátrixokból és a izospin-operátorból épül fel.

A (B.1) várható értékek kiszámolása érdekében bevezetjük a módosított, hőmérsékletfüggő Heisenberg-képet [8], amelyre az

$$O_K(\vec{x}\tau) = e^{K\tau} O_S(\vec{x}) e^{-K\tau} \quad (\text{B.3})$$

összefüggéssel térünk át, ahol $O_S(\vec{x})$ és $O_K(\vec{x}, \tau)$ tetszőleges operátor megfelelői a Schrödinger-képben és a hőmérsékletfüggő Heisenberg-képben. A hőmérsékletfüggő kép operátorainak „időfüggését” a

$$\frac{\partial}{\partial \tau} O_K(\tau) = [K, O_K(\tau)] \quad (\text{B.4})$$

egyenlet határozza meg. Tetszőleges Schrödinger-képbeli operátor megfelelőjét úgy kapjuk meg tehát a hőmérsékletfüggő képben, hogy a b , b^+ , d és d^+ operátorokat a megfelelő „időfüggő” $b(\tau)$, $b^+(\tau)$, $d(\tau)$ és $d^+(\tau)$ operátorokkal helyettesítjük. A keltő és megsemmisítő operátorok „időfüggése” a (B.4) egyenlet, K (5.1) kifejezése és a (4.12) felcserélési relációk segítségével

$$\begin{aligned} b(\tau) &= b \exp[-(E^{(+)} - \mu)\tau], & d(\tau) &= d \exp[(E^{(-)} - \mu)\tau], \\ b^+(\tau) &= b^+ \exp[(E^{(+)} - \mu)\tau], & d^+(\tau) &= d^+ \exp[-(E^{(-)} - \mu)\tau] \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

alakúnak adódik. (Az egyszerűség kedvéért elhagytuk a λ és \vec{p} indexeket.) A kvázinukleontér operátorai tehát a hőmérsékletfüggő képben:

$$\psi_K(\vec{x}\tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ e^{i\vec{p}\vec{x} - [E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]\tau} b_\lambda(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p}) + e^{-i\vec{p}\vec{x} - [E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]\tau} d_\lambda^+(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p}) \}, \quad (\text{B.6})$$

$$\psi_K^+(\vec{x}\tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ e^{i\vec{p}\vec{x} + [E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]\tau} d_\lambda(\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})^+ + e^{-i\vec{p}\vec{x} + [E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]\tau} b_\lambda^+(\vec{p}) U^\lambda(\vec{p})^+ \}. \quad (\text{B.7})$$

A (B.1) várható érték (B.6) és (B.7) felhasználásával átírható:

$$\begin{aligned} j &= \text{Tr} \left\{ \varrho_G : \bar{\psi}_K \Gamma \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \psi_K : \right\} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}\lambda} \{ [\bar{U}^\lambda(\vec{p}) \Gamma(x, \vec{p}) U^\lambda(\vec{p})] n_\lambda(\vec{p}) - [\bar{V}^\lambda(\vec{p}) \Gamma(x, -\vec{p}) V^\lambda(\vec{p})] \bar{n}_\lambda(\vec{p}) \}, \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

ahol $\Gamma(x, \vec{p}) = \vec{p} \vec{\Gamma}_1(x) + \Gamma_0(x)$. Bevezettük továbbá a kvázinukleon-állapotok és az antikvázinukleon-állapotok betöltési valószínűségét:

$$n_\lambda(\vec{p}) = \text{Tr} \{ \varrho_G b_\lambda^+(\vec{p}) b_\lambda(\vec{p}) \}, \quad \bar{n}_\lambda(\vec{p}) = \text{Tr} \{ \varrho_G d_\lambda^+(\vec{p}) d_\lambda(\vec{p}) \}. \quad (\text{B.9})$$

A (B.8) várható értékek kiszámolásához részben a betöltési valószínűségek, részben pedig a szögletes zárójelekben található spurok ismerete szükséges.

Foglalkozzunk először a (B.9) betöltési valószínűségekkel. A termodinamikai potenciál (5.13) kifejezését felhasználva kapjuk, hogy a barionok száma a rendszerben

$$N = - \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \sum_{\vec{p}, \lambda} \left\{ \frac{1}{1 + e^{[E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu]/T}} - \frac{1}{1 + e^{-[E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu]/T}} \right\}, \quad (\text{B.10})$$

ahonnan leolvashatók a betöltési valószínűségek (5.10) kifejezései.

Térjünk most rá a (B.8)-ban szereplő spurok kiszámítására. Ehhez vizsgáljuk meg a $T=0$ esetet. Ha összehasonlítjuk a téroperátorok hőmérsékletfüggő Heisenberg-képbenei (B.6) és (B.7) kifejezéseit a megfelelő (4.15) és (4.16) Heisenberg-operátorokkal, akkor nyilvánvaló, hogy $T=0$ esetben az alapállapot

$$\langle 0 | : \bar{\psi}_v \Gamma \psi_v : | 0 \rangle \quad (\text{B.11})$$

várható érték csupán annyiban különbözik (B.8)-tól, hogy a betöltési valószínűségek helyett a $\theta(-E_\lambda^{(+)}(\vec{p}) - \mu)$ és $\theta(E_\lambda^{(-)}(\vec{p}) - \mu)$ függvények állnak, a spurok azonban változatlanok (nem függenek a hőmérséklettől).

Bontsuk ψ_v -t pozitív és negatív frekvenciájú részre, $\psi_v = \psi^{(+)} + \psi^{(-)}$. Ekkor

$$\begin{aligned} \langle 0 | : \bar{\psi}_v \Gamma \psi_v : | 0 \rangle &= \langle 0 | : \bar{\psi}_v(x) \Gamma \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) \psi_v(x) : | 0 \rangle = \\ &= \lim_{x' \rightarrow x} \Gamma_{\beta\alpha} \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) [\langle 0 | : \bar{\psi}_\beta^{(+)}(x') \psi_\alpha^{(+)}(x) : | 0 \rangle - \langle 0 | : \psi_\alpha^{(-)}(x') \bar{\psi}_\beta^{(-)}(x) : | 0 \rangle] = \\ &= -i \lim_{x' \rightarrow x} \Gamma_{\beta\alpha} \left(x, -i \frac{\partial}{\partial \vec{x}} \right) [G_{\alpha\beta}^{(+)}(x - x') + G_{\alpha\beta}^{(-)}(x' - x)], \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

ahol

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}^{(+)}(x - x') &= i \langle 0 | : \bar{\psi}_\beta^{(+)}(x') \psi_\alpha^{(+)}(x) : | 0 \rangle, \\ G_{\alpha\beta}^{(-)}(x' - x) &= i \langle 0 | : \bar{\psi}_\beta^{(-)}(x) \psi_\alpha^{(-)}(x') : | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

A $G_{\alpha\beta}^{(+)}(x - x')$ függvény az

$$\gamma^0 \left\{ i \gamma^s \partial_s - g_\omega \bar{\omega}_0 \gamma^0 - m^* + (\vec{\gamma} \vec{k}) \left[\frac{\tau_3}{2} + g_\pi \frac{\vec{\pi}}{\sqrt{2}} \gamma_5 (\tau_1 - \tau_2) \right] \right\} G^{(+)}(x - x') = \delta^{(4)}(x - x') \quad (\text{B.14})$$

egyenlet megoldása olyan határfeltétellel, hogy ($V \rightarrow \infty$ esetén)

$$G^{(+)}(x-x') = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} e^{ip(x'-x)} G(p), \quad (\text{B.15})$$

ahol $G(p)$ a (4.17) Green-függvény és a p_0 szerinti integrálás útját a felső félsíkon zárjuk, azokat a $p_0 = E_\lambda^{(+)}(\vec{p})$ pólusokat zárva közre, amelyek a $T=0$ állapotban betöltött állapotoknak felelnek meg. Így

$$G^{(+)}(x-x') = i \sum_\lambda \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} [\theta(\mu - E_\lambda^{(+)}(\vec{p})) \text{Res } G(p) e^{-ip(x'-x)}]_{p_0 = E_\lambda^{(+)}(\vec{p})}. \quad (\text{B.16})$$

Behelyettesítjük (B.16)-ot (B.12) első tagjába, amely így a

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left\{ \Gamma(x, \vec{p}) \sum_\lambda \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} [\theta(\mu - E_\lambda^{(+)}(\vec{p})) \text{Res } G(p)]_{p_0 = E_\lambda^{(+)}(\vec{p})} \right\} = \\ & = \sum_{t=\pm 1} t \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{1}{4A^2 E_t(\vec{p})} \theta(v - E_t(\vec{p})) \text{Sp} \{ \Gamma(x, \vec{p}) N(p) \}_{p_0 = E_t(\vec{p})} \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

alakot ölti, $v = \mu - g_\omega \bar{\omega}_0$. Áttérve (B.8)-ban is a $V \rightarrow \infty$ határesetre, a (B.17) képlettel való összehasonlítás azt mutatja, hogy

$$\begin{aligned} \bar{U}^\lambda(\vec{p}) \Gamma(x, \vec{p}) U^\lambda(\vec{p}) &= t \frac{1}{4A^2 E_t(\vec{p})} \text{Sp} \{ \Gamma(x, \vec{p}) N(p) \}_{p_0 = E_t(\vec{p})} \\ & (\lambda = (s, t), s = \pm 1, t = \pm 1). \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Az U és V spinorokra vonatkozó (4.7) és (4.8) egyenleteket összehasonlítva kitűnik, hogy (B.18)-ban elvégezve a $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, $E_t \rightarrow -E_t$ cserét, meghatározhatjuk a (B.8) kifejezésben szereplő másik spurt is:

$$\bar{V}^\lambda(\vec{p}) \Gamma(x, -\vec{p}) V^\lambda(\vec{p}) = -t \frac{1}{4A^2 E_t(\vec{p})} \text{Sp} \{ \Gamma(x, -\vec{p}) N(p) \}_{p_0 = -E_t(\vec{p})}. \quad (\text{B.19})$$

A (B.18) és (B.19) képletek segítségével tetszőleges egyrészecske-operátor várható értéke (B.8) alapján:

$$\begin{aligned} j &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}(st)} t \frac{1}{4A^2 E_t} [\text{Sp} (\Gamma(x, \vec{p}) N(p))_{p_0 = E_t(\vec{p})} n_t(\vec{p}) + \\ & + \text{Sp} (\Gamma(x, -\vec{p}) N(p))_{p_0 = -E_t(\vec{p})} \bar{n}_t(\vec{p})]. \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

(Az Sp spurt a „spin”- és izospinindexek, azaz 8 spinorindex szerint kell képezni.)

A továbbiakban a minket érdeklő fizikai mennyiségek kiszámításához az alábbi spurokra lesz szükségünk:

$$\text{Sp}(N) = 8m^* \{(PP) - \varepsilon^2 - 2g_\pi^2 \bar{\pi}^2(kk)\}, \quad (\text{B.21a})$$

$$\text{Sp}(\gamma_n N) = 8 \left\{ (PP - \varepsilon^2) P_n - (1 + 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2)(Pk) \frac{1}{2} k_n \right\}, \quad (\text{B.21b})$$

$$\text{Sp}(\gamma_5 \gamma^s k_s \tau_1 N) = 8g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \{(PP - \varepsilon^2)(kk) + 2m^{*2}(kk) - 2(Pk)^2\} = -\text{Sp}(\gamma_5 \gamma^s k_s \tau_2 N), \quad (\text{B.21c})$$

$$\text{Sp}(\gamma_n \tau_3 N) = -8 \left\{ \frac{1}{2} (PP - \varepsilon^2) k_n - (Pk) P_n \right\}, \quad (\text{B.21d})$$

$$\text{Sp}(\gamma_5 \gamma_n \tau_1 N) = 8g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} \{(PP - \varepsilon^2) k_n + 2m^{*2} k_n - 2(Pk) P_n\} = -\text{Sp}(\gamma_5 \gamma_n \tau_2 N), \quad (\text{B.21e})$$

$$\text{Sp}(\gamma_0 \gamma_5 \gamma_n \tau_1 N) = 8g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} m^* (2P_0 k_n + ig_{0n}(kk)), \quad (\text{B.21f})$$

$$\text{Sp}(\gamma_0 \gamma_5 \gamma_n \tau_2 N) = 8g_\pi \frac{\bar{\pi}}{\sqrt{2}} m^* (-2P_0 k_n + ig_{0n}(kk)), \quad (\text{B.21g})$$

$$\text{Sp}(\gamma_0 \gamma_5 \gamma_n \tau_3 N) = 0. \quad (\text{B.21h})$$

Meg kívánjuk még jegyezni, hogy az átlagtér közelítésben kölcsönhatásmentes rendszer egyrészecske-operátorainak várható értékét a szokásos Heisenberg-képben is megkaphatjuk, hiszen (B.8) szerint a spurok nem függnek a hőmérséklettől. Azért használtuk mégis a hőmérsékletfüggő Heisenberg-képet, mert az lehetőséget nyújt a perturbációszámítás magasabb rendjében is a számítások elvégzésére.

C. Függelék. Az integrálok kiszámítása

A $V \rightarrow \infty$ határesetben a fizikai mennyiségek kiszámítására szolgáló (B.20) képlet az impulzustérre vonatkozó integrálást tartalmaz, amely az alábbi módon visszavezethető egyszeres integrálra:

a) Pion-kondenzált fázis:

Vezessük be az egyszerűség kedvéért az alábbi jelöléseket:

$$r^2 = 4g_\pi^2 \bar{\pi}^2, \quad \alpha^2 = 1 + r^2, \quad \beta^2 = r^2 m^{*2}, \quad \varepsilon^2 = m^{*2} + \frac{1}{4} \alpha^2 \vec{k}^2, \quad (\text{C.1})$$

$$x \equiv p_\perp \geq 0, \quad -\infty < y \equiv p_\parallel < +\infty. \quad (\text{C.2})$$

A (B.20) képlet

$$\int d\vec{p} F_\pm(\vec{p}_\perp^2, p_\parallel^2) = 2\pi \int_0^\infty x dx \int_{-\infty}^\infty dy F_\pm(x^2, y^2) = 4\pi \int_0^\infty x dx \int_0^\infty dy F_\pm(x^2, y^2) \quad (\text{C.3})$$

típusú integrálokat tartalmaz. Végezzük most el az $x, y \rightarrow v, z$ koordinátatranszformációt, ahol

$$v \equiv \sqrt{\frac{\alpha^2}{\beta^2} \left(x^2 + y^2 + \varepsilon^2 + t\Delta^2 - \frac{m^{*2}}{\alpha^2} \right)} \geq 0, \quad z \equiv \sqrt{\frac{\alpha^2}{\beta^2} y^2 + 1} \geq 1. \quad (\text{C.4})$$

A (4.19)–(4.21) és az (5.10) összefüggéseket felhasználva kapjuk, hogy a (C.4) változókkal kifejezve

$$E_t = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\beta^2 v^2 + m^{*2}} \equiv E(v^2), \quad \Delta^2 = k\beta|z| = k\beta z, \quad (\text{C.5a})$$

$$n_{\pm} + \bar{n}_{\pm} = \{1 + e^{[E(v^2) - v]/T}\}^{-1} + \{1 + e^{[v - E(v^2)]/T}\}^{-1} \equiv \theta(v^2). \quad (\text{C.5b})$$

A (C.4) változótranszformáció Jacobi-determinánsa

$$J = \frac{\partial(x, y)}{\partial(v, z)} = \frac{\beta^4}{\alpha^4} \frac{vz}{xy}. \quad (\text{C.6})$$

Jelölje \mathcal{T}_{\geq} azt a tartományt, amely az (x, y) -sík első síknegyedének a képe $t = \pm 1$ esetén. Ekkor a (C.3) integrál

$$\int d\vec{p} F_{\pm}(\vec{p}_{\perp}^2, p_{\parallel}^2) = 4\pi \frac{\beta^3}{\alpha^3} \int_{\mathcal{T}_{\geq}} dv dz \frac{vz}{\sqrt{z^2 - 1}} F_{\pm}(v^2, z^2), \quad (\text{C.7})$$

ahol $F_{\pm}(v^2, z^2)$ az $F_{\pm}(x^2, y^2)$ függvényből

$$x = \sqrt{\frac{\beta^2}{\alpha^2} v^2 - y^2 - \varepsilon^2 - t\Delta^2 + \frac{m^{*2}}{\alpha^2}} = \frac{\beta}{\alpha} \sqrt{v^2 - (z + tz_0)^2}, \quad (\text{C.8a})$$

$$y = \frac{\beta}{\alpha} \sqrt{z^2 - 1} \quad (\text{C.8b})$$

helyettesítéssel adódik; $z_0 = |\vec{k}|\alpha^2/2\beta > 0$.

Az integrálás \mathcal{T}_{\geq} tartománya t és z_0 értékétől függ:

1. Ha $t = +1$, akkor

$$\int_{(\mathcal{T}_{\geq})} dv dz \rightarrow \int_{1+z_0}^{\infty} dv \int_1^{v-z_0} dz, \quad (\text{C.9a})$$

2. Ha $t = -1$, akkor $z_0 < 1$ esetén

$$\int_{(\mathcal{T}_{\geq})} dv dz \rightarrow \int_{1-z_0}^{\infty} dv \int_1^{v+z_0} dz, \quad (\text{C.9b})$$

és $z_0 > 1$ esetén

$$\int_{(\mathcal{T}_{\geq})} dv dz \rightarrow \int_0^{z_0-1} dv \int_{z_0-v}^{z_0+v} dz + \int_{z_0-1}^{\infty} dv \int_1^{z_0+v} dz \rightarrow \int_0^{z_0-1} dv \int_{z_0-v}^1 dz + \int_0^{\infty} dv \int_1^{z_0+v} dz. \quad (\text{C.9c})$$

Az F_{\pm} függvények esetünkben

$$F_{\pm}(v^2, z^2) = \theta(v^2)G_{\pm}(v^2, z^2) \quad (\text{C.10})$$

alakúak. A (C.9a), ill. (C.9b) esetben $\xi = v - z_0$, ill. $v + z_0$ változó bevezetése után a (C.7) integrál

$$\int d\vec{p} F_{\pm}(\vec{p}_{\perp}^2, p_{\parallel}^2) = 4\pi \frac{\beta^3}{\alpha^3} \int_1^{\infty} d\xi \int_1^{\xi} dz \frac{z}{\sqrt{z^2 - 1}} [v\theta(v^2)G_{\pm}(v^2, z^2)]_{v=\xi \pm z_0} \quad (\text{C.11})$$

alakra hozható. A (C.9c) esetben az első tagban $\xi = z_0 - v$, a másodikban $\xi = z_0 + v$ változóra térve át, ugyanarra az eredményre jutunk, mint a (C.9b) esetben.

A (B.20) kifejezés tehát általában

$$j = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^3 \int_1^{\infty} d\xi \int_1^{\xi} dz \frac{z}{\sqrt{z^2 - 1}} \{ [v\theta(v^2)G_{+}(v^2, z^2)]_{v=\xi+z_0} + [v\theta(v^2)G_{-}(v^2, z^2)]_{v=\xi-z_0} \} \quad (\text{C.12})$$

alakot ölt. A számunkra érdekes esetekben a z -szerinti integrálás közvetlenül elvégezhető.

Alkalmazzuk most a (C.12) összefüggést a (8.2) feszültségkülönbség kiszámolására. Most

$$G_{\pm}(v^2, z^2) = \frac{\beta^2}{\alpha^2} \left(\frac{3}{2} z^2 \pm 2zz_0 + \frac{1}{2} z_0^2 - 1 - \frac{1}{2} v^2 \mp \frac{z_0}{z} \right),$$

és a z -szerinti integrálás elvégzése után az adódik, hogy

$$\Delta\sigma = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\beta}{\alpha} \right)^5 \int_1^{\infty} d\xi \left\{ \left[\frac{v\theta(v^2)}{E(v^2)} \right]_{v=\xi+z_0} + \left[\frac{v\theta(v^2)}{E(v^2)} \right]_{v=\xi-z_0} \right\} \\ [\xi^2 \sqrt{\xi^2 - 1} - (\xi^2 - 1)^{3/2} - \sqrt{\xi^2 - 1}] = 0, \quad (\text{C.13})$$

mivel a szögletes zárójelben álló kifejezés azonosan zérus. Így igazoltuk a (8.3) egyenlőséget.

b) Normál fázis:

Az anizotrop normál fázisban $\vec{k}=0$, $\Delta^2=0$, $\varepsilon^2=m^{*2}$, $r^2=0$, $\alpha^2=1$ és $\beta^2=0$. Vezessük be az x változó helyett a

$$v = \sqrt{x^2 + \alpha y^2 + m^{*2}} > 0 \quad (\text{C.14})$$

változót. Az új v , y változók segítségével

$$E_t(x) = \sqrt{x^2 + \alpha y^2 + m^{*2}} = v, \quad (\text{C.15a})$$

$$n_{\pm} + \bar{n}_{\pm} = [1 + e^{(v-v)/T}]^{-1} + [1 + e^{(v+v)/T}]^{-1} \equiv \theta(v), \quad (\text{C.15b})$$

$$E_t = \sqrt{x^2 + y^2 + m^{*2}} = \sqrt{v^2 + y^2(1 - \alpha)} \equiv E(v^2, y^2), \quad (\text{C.15c})$$

és a keresett integrálok

$$\int d\vec{p} F_{\pm}(\vec{p}_{\perp}^2, p_{\parallel}^2) = 4\pi \int_0^{\infty} dy \int_a^{\infty} v dv F_{\pm}(v^2, y^2) = 4\pi \int_{m^*}^{\infty} dv \theta(v) \int_0^{\frac{1}{\alpha} \sqrt{v^2 - m^{*2}}} \frac{dy g_{\pm}(v^2, y^2)}{E(v^2, y^2)}, \quad (\text{C.16})$$

$$F_{\pm}(v^2, y^2) = \theta(v) \frac{g_{\pm}(v^2, y^2)}{E(v^2, y^2)}; \quad a = \sqrt{m^{*2} + \alpha^2 y^2}$$

alakot öltenek, ahol az y -szerinti integrálás a számunkra érdekes esetekben elvégezhető.

IRODALOM

1. S. Nagamiya *et al.*, Phys. Rev. Lett. 48, 1780, 1982.
2. A. B. Migdal, Phys. Rev. Lett. 31, 247, 1973.
R. F. Sawyer, D. J. Scalapino, Phys. Rev. D7, 1953, 1973.
W. Weise, G. E. Brown, Phys. Reports 27C, 1, 1976.
3. I. Lovas, Nucl. Phys. A367, 509, 1981.
4. B. Banerjee, N. K. Glendenning, M. Gyulassy, Nucl. Phys. A361, 326, 1981.
5. M. Rho, D. Wilkinson: Mesons in Nuclei, Amsterdam—New York—Oxford, North-Holland Publishing Company, 1979, Vol. III., 1031.
6. S. Krewald, J. W. Negele, Phys. Rev. C21, 2385 1980.
7. N. F. Nyelipa: Fizika elementarnüh csasztyic, Moszkva, Vüszsaja skola, 1977.
8. A. L. Fetter, J. D. Walecka: Quantum Theory of Many-Particle Systems, New York, McGraw-Hill, Inc., 1971.

AZ IZOBÁR ANALÓG ÁLLAPOTOK FINOMSZERKEZETE*

FODOR ILONA

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	30
Célkitűzés	32
I. KÍSÉRLETI MÓDSZER AZ IZOBÁR ANALÓG REZONANCIÁK VIZSGÁLATÁRA	32
A) <i>Izobár analóg állapotok megjelenési formái különböző nívósűrűségű magtartományokban</i>	32
a) Izobár analóg állapotok a könnyű magokban ($A < 40$)	32
b) Izobár analóg állapotok a közepesen nehéz magok tartományában ($40 < A < 70$)	34
c) Izobár analóg állapotok a nehéz magokban ($A > 70$)	36
B) <i>Az IAR kutatásban alkalmazott gerjesztési függvények</i>	36
a) Integrális típusú gerjesztési függvények	37
b) Ablakban mért gerjesztési függvények	40
c) Differenciális gerjesztési függvény	41
d) Speciális végállapotok	43
e) Elágazási arányok	45
f) A módszer előnyei és korlátai	46
II. KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK	47
<i>Mérési elrendezés</i>	47
A) <i>$A^{63}\text{Cu} + p$ rendszer vizsgálata</i>	48
A $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ magreakció	49
A $g_{9/2}$ IAR és az antianalóg állapotok szerkezete a ^{64}Zn magban	53
B) <i>$A^{56}\text{Fe} + p$ rendszer vizsgálata</i>	55
A $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció	56
Gerjesztési függvények	56
Szögeloszlás mérések	57
A $g_{9/2}$ antianalóg állapot	60
Nívósűrűség a ^{57}Co magban	62
Az abszolút γ átmeneti valószínűségek	63
C) <i>$A^{52}\text{Cr} + p$ rendszer vizsgálata</i>	64
A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakció	65
Szögeloszlás vizsgálatok	65
A rezonanciák γ bomlása	75
Abszolút átmeneti valószínűségek	76
A $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ magreakció	77
III. DISZKUSSZIÓ	78
III/1. Az analóg állapotok finomszerkezetének analízise	78
A) <i>Az erősségfüggvény definíciója</i>	78
B) <i>IAR finomszerkezet analízisének módszerei</i>	81
a) Mekjian és MacDonald (1967)	82
b) MacDonald-féle módszer (1978)	82

* Doktori értekezés, 1980. Érkezett 1982. március 29.

C) Erősségfüggvény a gamma csatornában	83
D) $A^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban talált $g_{9/2}$ IAR erősségfüggvényének analízise két módszerrel	84
a) Mekjian és MacDonald (1967) módszer szerinti analízis	84
b) MacDonald (1978) féle 5 paraméteres erősségfüggvény módszer szerinti analízis	85
c) Az IAR hullámfüggvény szerkezete a Γ_0 érték alapján	88
E) $A^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióban talált $g_{9/2}$ IAR komponensek analízise a MacDonald-féle 5 paraméteres módszerrel	89
III/2. Megállapítások a felhasadt IAR-ek tulajdonságaira vonatkozóan	89
A) Izobár analóg rezonanciák megjelenése a különböző csatornáknál	90
a) Korreláció a rugalmas proton szórás és a gamma csatornák között	90
b) Korreláció a rugalmas és rugalmatlan proton szórási csatornák között	91
B) Rezonanciák finomszerkezetének elmélete a kísérleti tapasztalatok tükrében	93
a) Egyetlen doorway állapot a háttérmentes „c” csatornában	93
b) Egyetlen doorway állapot a „c” csatornában, ahol a bonyolultabb állapotok is csatlódnak a kontinuumhoz	95
c) Több csatornában megjelenő közös doorway állapot	96
d) Erősségfüggvény a különböző csatornáknál	97
e) Szétszóródási szélesség	98
IV. ÖSSZEFOGLALÁS	99
V. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS	102

BEVEZETÉS

Az izobár analóg állapotok kísérleti és elméleti vizsgálata teljes hatékonysággal a hatvanas évek végén indult meg. A magfizikai kutatások számára nagy fellendülést jelentett a különlegesen érdekes típusú állapotok tanulmányozása. Az izobár multiplettek létezése a könnyű magokban már régóta ismeretes volt. Izobár multiplettekbe tartoznak azok a magállapotok, amelyek azonos tömegszám érték és azonos törzs szerkezet mellett csak egy neutronnak protonná történő kicserélésében különböznek egymástól. Anderson és Wong méréseiből (Anderson—Wong 1961) derült ki, hogy ilyen töltés multiplettbe tartozó állapotokat nehezebb magok esetében is találhatunk. Később Fox és társai (Fox *et al* 1964) (p, p) és (p, n) reakciókban mutatták ki jelenlétüket. Ezek a felfedezések nagy meglepetést jelentettek a korábbi elgondolásokkal szemben, amelyek szerint a Coulomb energiának töltésfüggő hatása csak a könnyű magok esetében elhanyagolható, de nem várhatjuk ezt a nehezebb tömegszámú magoknál, ahol a Coulomb energia és a nukleáris energia összemérhető. Ilyenkor ugyanis a Coulomb kölcsönhatás számottevő, és nem remélhetjük, hogy határozott izospinnel rendelkező állapotokat találunk egymástól jól elkülönülve, azaz töltés multipletteket, mert az adott izospinnel bíró magállapotok a Coulomb kölcsönhatás miatt elkeverednek az eltérő izospinű szomszédos állapotok tengerében.

A valóság nem az extrém elképzeléseket tükrözi, hanem annál sokkal színesebb, bonyolultabb és érdekesebb jelenséget tár elénk. Izobár analóg állapotok léteznek a közepesen nehéz és a nehéz magokban is, de a Coulomb kölcsönhatás miatt létrejön a szomszédos állapotokkal való keveredés. Így az analóg állapotok erőssége sokszor több közeli nívóra felhasadva, eloszolva jelenik meg, azaz az analóg állapot finom szerkezettel bír. Nem olvad fel teljesen a háttér állapotok között, tehát megtalálható, de nem tartja meg annyira individualitását, hogy mint egyetlen magállapot jelenjék

meg. Hasonló jelenséget tárgyal *Lane, Thomas és Wigner (1955)* az óriás rezonanciákra vonatkozó cikkében.

Az izobár analóg állapotoknak a 60-as években megindult nagyütemű nemzetközi kutatásába kapcsolódtunk be a (p, γ) reakciókban megtalálható analóg rezonanciák vizsgálatával. Az analóg rezonanciáknak a részecske csatornában történt felfedezése után ugyanis hamarosan kiderült, hogy a proton befogással kialakult analóg állapotok a gamma bomlási csatornában is jelentkeznek. A (p, γ) típusú magreakciók magas Q értéke teszi lehetővé azt, hogy az 5 MeV-es Van de Graaff generátornál rendelkezésre álló bombázó energiákkal a közepesen nehéz ($40 < A < 90$) atommagoknak olyan magas gerjesztési energiájú tartományait vizsgálhatjuk, ahol az izobár analóg állapotok megjelennek ($E_x \sim 8 - 13$ MeV).

Az izobár analóg állapotokon végzett hazai kísérleti vizsgálatokat két nagy témakörbe lehet csoportosítani:

- I. az egyrészecske típusú analóg \rightarrow antianalóg izovektor M1 γ átmenetek vizsgálata, az egyszerű szerkezetű szülő — analóg — antianalóg állapotok rokonsága és kapcsolata (lásd pl. *Fodor Ilona 1970*).
- II. a finom szerkezettel rendelkező izobár analóg állapotok kutatásának módszerei és az eredmények elméleti értelmezése a gamma bomlási csatornában, amely a jelen dolgozat tárgyát képezi.

A kutatások kezdeti szakaszában az alacsonyabb gerjesztési energiáknál, azaz kisebb nívósűrűségű tartományokban megtalálható izobár analóg állapotok vizsgálata volt a kitűzött cél. Később a vizsgálatok előhaladása szükségessé tette a több komponensre felhasadt komplikált szerkezetű izobár analóg állapotok megtalálását a magasabb gerjesztési energiáknál, tehát nagyobb nívósűrűségű tartományokban is. Nagy problémát jelentett a γ csatornára vonatkozó gerjesztési görbék felvétele ilyen nívósűrűség mellett, mert az addig használt módszerek itt már csődöt mondtak, és a talált számtalan, többé-kevésbé azonos erősségű rezonanciát látva lehetetlennek tűnt az a feladat, hogy az analóg állapot komponenseit felismerjük.

Alkalmas módszerrel azonban lehetővé vált az analóg állapotok erősség eloszlásának felkutatása a γ csatornában is. Az ezután következő lépés ennek az eloszlásnak, másnéven „erősségfüggvénynek” elméleti értelmezése. A rugalmas proton szórában talált analóg rezonanciák komponenseiből származó erősségfüggvények elméleti interpretációját több szerző diszkutálta az irodalomban, ahogyan ezekről majd a tárgyalás során említést teszünk. Az izobár analóg állapotok esetén a gamma csatornára eddig ezt nem terjesztették ki. Mi ezt az analízist a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakció méréseiből származó eredményeinken elvégeztük, és segítségével meghatároztuk a $g_{9/2}$ izobár analóg rezonanciának a γ csatornában jelentkező „szétszóródási szélességet” (Γ^i). Ez a szélesség, amely minden „doorway” állapotnak egyik legfontosabb jellemzője, felvilágosítást ad annak a kölcsönhatásnak az erősségéről, amely a „doorway”-nek környező állapotokkal való csatolódását, keveredését létrehozta. A saját és az irodalomban található mérések analíziséből igen érdekes következtetéseket lehet levonni az izobár analóg rezonanciák (IAR-ek) szétszóródási szélességére és a különböző reakciócsatornák közötti korrelációra vonatkozóan is.

CÉLKITŰZÉS

Jelen tanulmány célja az, hogy ismertesse

- I. azt az évek során kidolgozott kísérleti módszert, amely lehetővé teszi, hogy a közepesen nehéz magok tartományában nagyobb gerjesztési energiáknál (~ 10 MeV) jelentkező meglehetősen nagy nívósűrűség értékek esetében (ahol az átlagos nívótávolság: $D \sim 1$ keV) is megtaláljuk az izobár analóg állapotokat a γ reakció csatornában.
- II. azokat a kísérleti eredményeket, amelyeket a fenti módszer alkalmazásával kaptunk a $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$, $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ és a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakciókban fellelt $g_{9/2}$ analóg rezonanciák esetén.
- III. azt az elméleti módszert, amellyel a γ csatornában mért finomszerkezeti képet értelmeztük.
- IV. azokat az elméleti következményeket, amelyek a mérési tapasztalatokból és elméleti megfontolásokból származnak az izobár analóg rezonanciák „erősségfüggvényére” és ennek a szélességére vonatkozóan, továbbá az egyes reakció csatornák közötti korrelációra vonatkozóan.

Érdemes hangsúlyozni azt a tényt, hogy az eredmények Magyarországon végzett kísérletekből származnak. A vizsgálatok alapját a Központi Fizikai Kutató Intézet saját gyártmányú Van de Graaff generátorával végzett mérések képezték.

I. fejezet

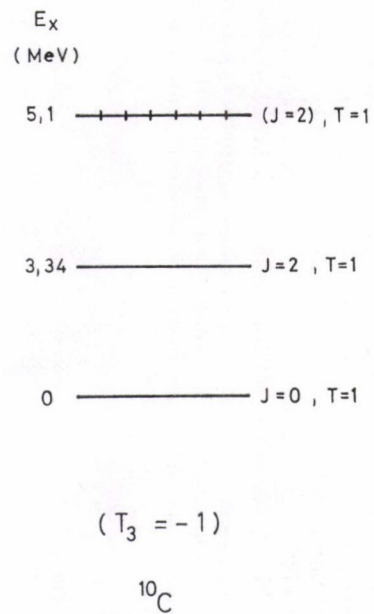
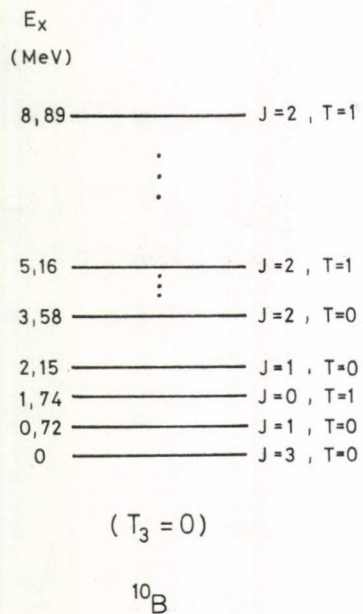
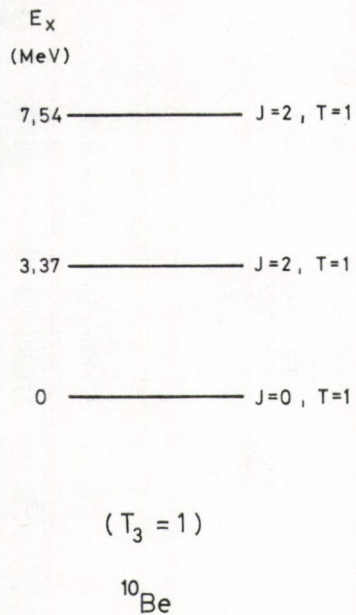
KÍSÉRLETI MÓDSZER AZ IZOBÁR ANALÓG REZONANCIÁK (IAR) VIZSGÁLATÁRA

A) Izobár analóg állapotok megjelenési formái különböző nívósűrűségű magtartományokban

Kiindulásul az analóg rezonanciáknak a különféle tömegszámú tartományokban talált megjelenési formáit tárgyaljuk és ezeket összehasonlítjuk a kísérleti vizsgálatok szempontjából.

a) Izobár analóg állapotok a könnyű magokban ($A < 40$)

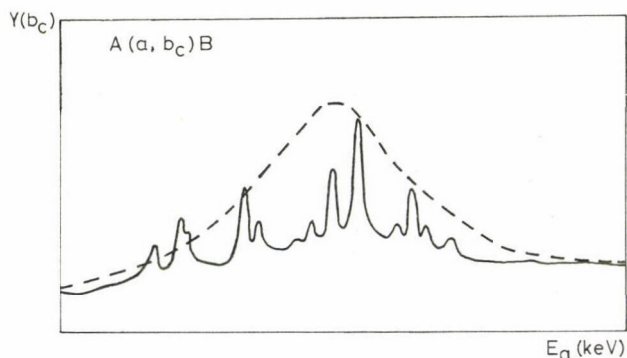
Ha magunk elé képzeljük a könnyű ($A < 20$) magokban régóta ismert töltésmultiplettek, az 1. ábrán is látható egyszerű képre gondolunk. Az egymásnak megfelelő azonos izospinű magállapotok majdnem azonos gerjesztési energiánál (Coulomb eltolódás még nem számottevő!) helyezkednek el a szomszédos magokban. Azt is megfigyelhetjük, hogy az analóg állapotok környezetében nem nagy a nívósűrűség. Ezek az állapotok egy — nívóra koncentrálódva teljesen egyértelműen azonosíthatók, felismerhetők. Még a gyengébb felbontású részecske transzfer reakciókban is egyértelműen identifikálni tudjuk őket, ahol mint a reakció végállapotai jelennek meg. Az analóg állapotok ebben a tömegszám tartományban még rendszerint kötött állapotok, és nem a közbenső magban található rezonanciák.

1. ábra. Töltés multiplettek az $A=10$ tömegszámánál

Ha a $20 < A < 40$ tömegszámú magok tartományát tekintjük, akkor már az analóg állapotok helye fokozatosan átcsúszik a kötött állapotok tartományából a folyamatos energiatartományokba, azaz a részecske bomlási küszöbök fölé. Az analóg állapotokat mint a közbenső magokban található rezonanciákat figyelhetjük meg. Ezek a rezonanciák kisebb nívósűrűségek mellett még mindig jól elkülönült, egységes állapotok, (Watson 1967, Engelbertink 1968) de már elkezdődik egy folyamat, amely a közepesen nehéz magoknál általánossá válik. Az analóg állapot, ha nagyobb nívósűrűségű tartományokba esik, nem mint egyszerű rezonancia jelenik meg, hanem komponensekre felhasadva (Keyworth 1966).

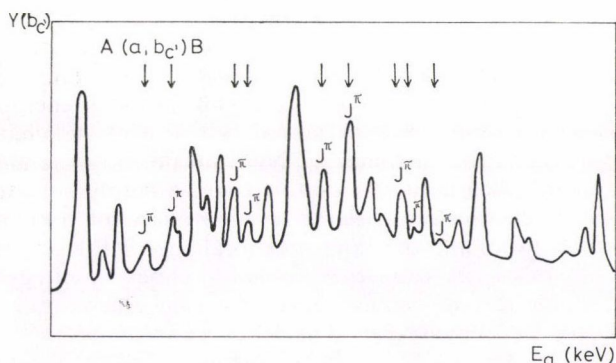
b) *Izobár analóg állapotok a közepesen nehéz magok tartományában*
($40 < A < 70$)

A $40 < A < 70$ tömegszám tartományban az izobár analóg rezonanciák nagy többsége már nem egyszerű, hanem bonyolult több komponensű rezonanciaként jelenik meg. A felhasadás oka a töltésfüggő Coulomb kölcsönhatás. A nagyobb nívósűrűség és a kölcsönhatás teszi lehetővé, hogy ebben a magtartományban a bevezetésben már említett óriásrezonancia-szerű képpel találkozunk. A felhasadt analóg rezonanciák a 2. ábrán láthatók.



2. ábra. Komponensekre felhasadt analóg rezonancia sematikus képe egy kitüntetett csatornában mért gerjesztési függvényben. Valamennyi rezonancia azonos J^π spin és paritás értékkel rendelkezik, mint az analóg állapot összetevői. Ilyen képet akkor látunk, ha az analóg rezonancia szélessége $\Gamma \gg D$, az átlagos nívótávolság. A finomszerkezetet burkoló szaggatott görbe adja meg az analóg rezonancia helyét és szélességét

Ez a típusú szerkezet található pl. egy kitüntetett gamma csatornában, vagy a rugalmatlan proton szórásban. Méréseink célja, hogy ezt megtaláljuk. Amíg nem ismertük fel, hogy melyik az a kiválasztott csatorna, amely a felhasadt analóg rezonanciát ilyen világosan tükrözi, addig a 3. ábrán látható bonyolult szerkezetű gerjesztési függvények állnak előttünk megfejtésre várakozva (azaz annak eldöntésére, hogy a jelenlévő rezonanciák között vannak-e analóg állapot komponensek). Ezért nagy



3. ábra. A 2. ábrán látható felhasadt analóg rezonancia megjelenése egy olyan gerjesztési függvényben, amely a környező más típusú rezonanciákra is érzékeny, tehát azok jelenlétét is kimutatja.

szükségünk van egy olyan módszer kidolgozására, amely lehetővé teszi, hogy nagy biztonsággal tudjuk vizsgálni azokat az izobár analóg rezonanciákat, amelyek a közepesen nehéz magokban magas gerjesztési energiáknál, nagy nívósűrűségű tartományokban találhatók és *több komponensre felhasadva jelentkeznek*. Ilyen esetben ugyanis nem várhatjuk, hogy a gerjesztési függvényben egyetlen erős rezonancia formájában jelenjen meg az analóg állapot, amely kiugrik a környező rezonanciák közül, mert erőssége megoszlik a komponensek között.

Meg kell jegyeznünk, hogy az analóg állapotok természetesen nemcsak a gamma csatornában, vagy a rugalmatlan proton szórási csatornában jelentkeznek felhasadva, hanem a rugalmas proton szórási csatornában is, ott, ahol az analóg állapot, ez a speciális típusú doorway állapot kialakul. Valójában a történeti sorrend is az volt, hogy először a rugalmas proton szórás gerjesztési függvényében fedezték fel az analóg rezonanciáknak ezt a finom szerkezetét, azaz több komponensre való felhasadását. Erre számtalan példát találhatunk pl. Bilpuch és társai 1976-ban megjelent összefoglaló művében. (Bilpuch 1976). Az amerikai Duke egyetemen ugyanis kidolgoztak egy olyan mérési elrendezést, amely lehetővé tette az analóg rezonanciák vizsgálatát a rugalmas proton szórásban 200–300 eV-os energia felbontással. Ezt a felbontást a generátor energia stabilitása tette lehetővé. A céltárgy vastagságot ennek megfelelő vékonyra választották. A rugalmas proton szórás nagy hatáskeresztmetszetű folyamat, ezért még kis intenzitású rezonanciákat is eredményesen lehetett mérni vékony céltárgyak alkalmazásával. A korlátozó tényező ebben az esetben a vizsgált rezonanciák „ l ” (pályamomentum) értéke. A szóban forgó proton bombázó energiák 1,5–3,5 MeV között voltak. A magba való behatolás és a protonnal való bomlás valószínűségét a penetrációs faktor szabja meg, ami a részecskék energiájától és „ l ” értékétől függ. $l=0, 1$ és 2 értékekre még az alacsony bombázó energiák mellett is elég nagy a penetráció ahhoz, hogy a rezonanciákat fel lehessen ismerni („ l ” értéküket meghatározni). A magasabb „ l ” értékek esetén ($l=3$ és $l=4$) ez a módszer nem alkalmas a felhasadt analóg rezonanciák kutatására. (A penetrációs faktor nemcsak a bemenő, de a kimenő csatornában is érezettil tölő hatását.)

Ezzel ellentétben kell megemlíteni a gamma csatorna vizsgálatának előnyét, ahol a penetrációs faktor kicsisége csak a bemenő csatornát érinti.

c) *Izobár analóg állapotok a nehéz magokban ($A > 70$)*

Ebben a tömegszám tartományban a legfontosabb megállapítás az izobár analóg rezonanciák helyzetére vonatkozik. A nagy Coulomb eltolódási energia miatt az állapotok meglehetősen nagy gerjesztési energiáknál, (kb. 15 MeV) találhatók meg, amely az (E1) óriás dipól rezonancia tartománya. Nyilvánvaló, hogy az analóg állapotok szerkezetét és bomlását főleg a gamma csatornában ez befolyásolhatja.

A nagy gerjesztési energia azt is jelenti, hogy az állapotok a különféle részecske bomlási küszöbök felett vannak. Minthogy ezek az állapotok főleg részecske emisszióval bomlanak, a γ bomlási valószínűségek sokkal kisebbek, mint egyébként.

Az itt talált analóg rezonanciáknak harmadik igen érdekes tulajdonsága, hogy teljes szélességük 100 keV nagyságrendű is lehet. (Ejiri *et al* 1969, Snover 1971.) Ez a teljes szélesség, mint minden „doorway” rezonanciánál itt is a természetes szélességeknek és a „szétszóródási” szélességnek az összegéből adódik. Az analóg rezonanciák finom szerkezettel rendelkeznek, de ez a finom szerkezet csak egészen extrém jó felbontású proton szórási mérésekben mutatható ki. A gamma csatorna itt már nem alkalmas a finom szerkezet kimutatására az igen nagy nívósűrűségek miatt. A finom szerkezet összeátlagolódott a fent említett méréseknél is, ahol a céltárgy vastagság 1 mg/cm^2 nagyságrendben volt ami $\sim 20 \text{ keV}$ -nek felel meg 10 MeV bombázó proton energián. Ezért a gamma csatornában mért gerjesztési függvény az izobár analóg rezonancia finom szerkezetét burkoló görbét tárja elénk, amit a közepesen nehéz magoknál a kiértékelés során elméletileg határozunk meg (lásd a 2. ábra szaggatott vonala). Itt is érvényes az, hogy az analóg rezonanciát speciális végállapotra menő γ átmenet gerjesztési függvényében találjuk meg. Más átmenetek gerjesztési függvényei ebben a bombázó energia tartományban sima energia függést mutatnak.

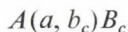
A nehéz magokban tanulmányozott analóg rezonanciák γ bomlásának vizsgálatában már a 60-as évek vége felé találkozunk azzal a felfedezéssel, mint mérési tapasztalattal, hogy az analóg állapot nem jelentkezik bármely gamma átmenet gerjesztési függvényében. Általános érvényű következtetést ebből nem vontak le és még 1975-ben is megjelent az ^{75}As -ben vizsgált analóg rezonanciákkal kapcsolatos olyan cikk, ahol jónévű szerző olyan gerjesztési görbéket mér a γ csatornában, ahol több különböző végállapotra menő γ sugárzást megkülönböztetés nélkül együtt mér (Schrader *et al.* 1975). A $g_{9/2}$ analóg rezonancia itt komponensekre hasadt fel, ahogyan azt a szerzők által közölt ábra is valószínűsíti, de a szerzők ezt elhanyagolják. Háttér korrekciót úgy végeznek, hogy a talált rezonancián kívül két távoli ponton meghatározott γ spektrumot vesznek alapul.

B) *Az IAR kutatásban alkalmazott gerjesztési függvények*

Ahhoz, hogy bármilyen típusú magreakciót jobban megismerjünk és bizonyos kijelentéseket tehesünk erre vonatkozóan, meg kell határozni a reakció hatás-keresztmetszetének energiafüggését. Ezt a kísérleti fizikus úgy fogalmazza meg, hogy megmérjük az adott magreakció gerjesztési függvényét a szóban forgó reakció csatorna, illetve csatornák esetén.

Jelöljük „A”-val azt a céltárgymagot, amelyet „a” típusú részecskenyalábbal bombázunk, „B_c”-vel a reakció eredményéül kapott maradékmagot, és „b_c”-vel a kimenő részecskenyalábot a „c” reakció csatornában.

A reakció tehát:



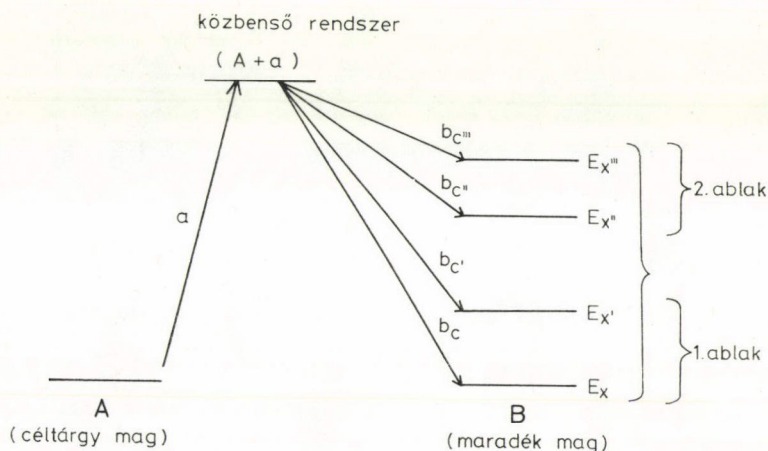
formában írható fel.

Ha vizsgálatunk tárgya éppen a „c” csatorna, akkor megmérjük a reakció „hozamát” a c csatornában, azaz az $Y(b_c)$ mennyiséget, amely az adott kísérleti elrendezés (térzőg, energiafelbontás, stb.) mellett mérhető „ b_c ” részecskék száma valamilyen időegység alatt. Az időegységet ésszerűségi okok determinálják; egyrészt kompromisszumot kell kötni arra vonatkozóan, hogy egy mérési pont ne vegyen igénybe túlságosan hosszú időt, másrészt az időtartam elegendő legyen annyi információ begyűjtésére, hogy megfelelően jó statisztika álljon rendelkezésünkre.

Az $Y(b_c)$ mennyiség értéke az „a” részecskenyaláb bombázó energiájának (E_a) függvényében pontról pontra változni fog, tükrözve a reakció hatáskeresztmetszeteinek energia függését. Az $Y(b_c, E_a)$ függvényt nevezzük a reakció „c” csatornájában mért gerjesztési függvényének, „ b_c ” jelenthet bármely részecskét és gamma sugárzást is. Ennek az egységes definíciónak ellenére a gamma csatornában alkalmazott gerjesztési függvények különböznek a részecskecsatornákra értelmezett függvényektől.

a) Integrális típusú gerjesztési függvények

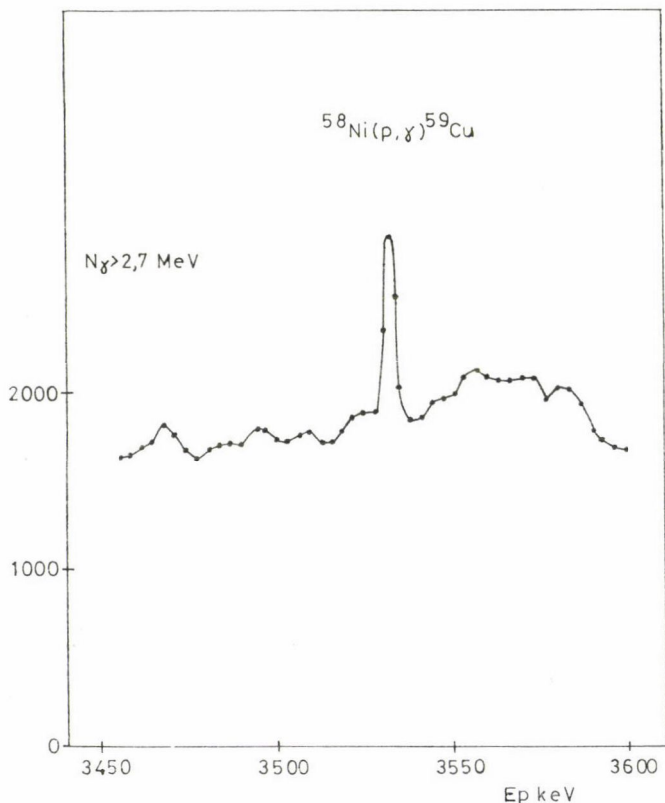
A céltárgymag, a közbenső rendszer és a végállapotok sematikus elrendeződése látható a 4. ábrán egy bizonyos bonyolultsági fokú közbenső rendszer esetén, amely a $(B+b_c)$ csatornába bomlik el. „ b_c ” most adott részecske típust jelöl, természetesen a végállapotok energiaszintjeitől függően különböző energiával. Ha „ b_c ” gamma bomlást jelöl, akkor az $(A+a)$ rendszer a B magnak egy magasabb gerjesztési energián fekvő nívóját, „ $b_c, b_{c'}, b_{c''}, \dots$ ” a különböző energiájú gamma átmeneteket jelenti.



4. ábra. A céltárgymag közbenső rendszer és a maradék mag a különböző gerjesztési energiáknál található végállapotokkal (E_x^i) és az ezeknek megfelelő különböző energiájú „ b_c^i ” részecskékkal az $A(a, b_c)B$ reakcióban

Integrális típusú gerjesztési függvénynek most azt nevezzük, ha detektorunkat úgy állítjuk be, hogy egyszerre nem egy végállapotra, hanem a „B” magnak egy gerjesztési energia tartományában található több különböző végállapotára vezető összes átmenetet detektáljuk egyszerre adott időtartamon belül, tehát az $Y(b_c, E_a)$ függvényt mérjük. (Itt most csak a végállapotok összeintegrálásáról van szó!)

Az analóg állapotok kutatásában (p, γ) reakciók esetén ez az integrális típusú gerjesztési görbe nagy szerepet játszott. Az izobár analóg rezonanciák megkeresését (p, γ) reakcióban a gamma átmenetek gerjesztési függvényének mérésével kellett kezdeni. Leghatásosabb módszernek az tűnt, ha valamennyi gamma átmenet mérése együtt történik. Ezért rendszerint NaI(Tl) kristályt használtak gamma detektálásra (lásd pl. Fodor 1972, Endt 1974, Bilpuch 1976) és egy bizonyos alsó energia küszöb felett (rendszerint $E_\gamma > 2,5$ MeV) a reakcióból származó összes gamma sugárzást mérték. A mennyiség energiafüggése olyannak bizonyult, hogy több esetben valóban kimutatta az izobár analóg állapot jelenlétét. Ilyenkor a környezetből erősen kiugró rezonancia tűnt fel a gerjesztési görbén. A rezonancia azonosítása könnyű volt az analóg állapotoknak előre kiszámolt pozíciója alapján. A mért és becsült értékek el-

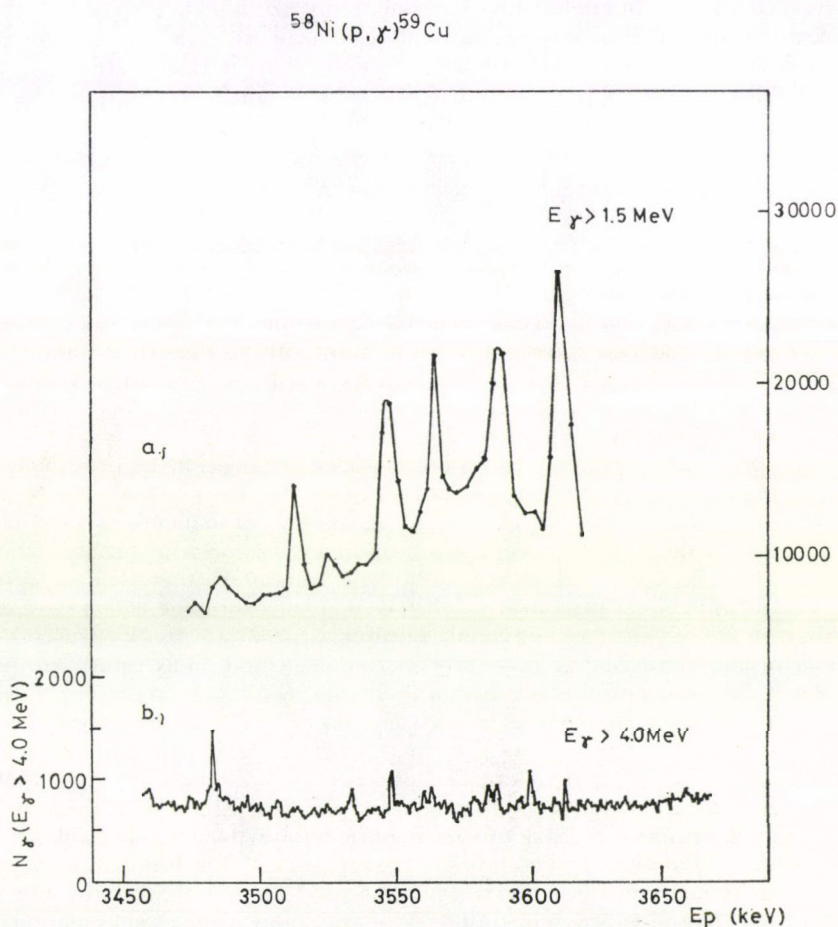


5. ábra. A $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)^{59}\text{Cu}$ magreakció integrális gerjesztési görbéje NaI(Tl) kristállyal mérve, $E_\gamma > 2,7$ MeV. A gerjesztési függvény mégis világosan jelzi az izobár analóg rezonancia helyét

térése rendszerint néhány 10 keV-en belül pontos volt. Saját régebbi méréseinkben is ezt a módszert alkalmaztuk (Fodor 1968, Fodor 1970, lásd még az 5. ábrát).

Később Ge(Li) félvezető detektorral is mértek integrális típusú gamma gerjesztési függvényt (pl. Klapdor 1975). Itt a detektor kis hatásfoka indokolta azt, hogy az összes γ -sugárzást egyszerre mérjük és ezzel növeljük a mérésben begyűjthető információ mennyiségét. Ettől függ ugyanis, hogy mennyi időbe telik a gerjesztési függvény egy pontjának meghatározása.

A mérések során hamarosan kiderült, hogy a gerjesztési függvények alakja gyakran az alkalmazott alsó küszöbenergiától függ. Ezt látjuk az 5., a 6a és 6b ábrákon bemutatott gerjesztési függvények összehasonlításából.



Az analóg rezonancia már egyáltalán nem tűnik ki

Ebből, és a spektrumok részletes tanulmányozásából az következett, hogy az IAR nem egyformán befolyásolja a teljes gamma spektrumot, hanem kitüntet bizonyos gamma átmeneteket. Ezeket a különleges átmeneteket kell megkeresnünk, és belőlük következtetni az analóg rezonanciák helyére. Ez az elgondolás vezetett az „ablakban” mért integrális típusú gerjesztési függvények bevezetéséhez.

b) Ablakban mért gerjesztési függvények

Tételezzük fel, hogy a maradék mag bizonyos E_x gerjesztési energiánál található nívóját az IAR γ bomlása valamilyen ok miatt kitünteteti. Ezzel szemben a szomszédos nívók nem jelentősek a bomlás szempontjából. Ha a mérés előtt nem ismerjük, hogy hol helyezkednek el a kitüntetett nívók, megtehetjük azt, hogy a γ spektrumot tartományokra osztjuk fel, és az egy-egy tartományra, azaz „ablakra” vonatkozó gerjesztési függvényt mérjük meg. A különböző „ablakok”-ban mért gerjesztési függvények egymástól különbözhetnek vagy hasonlóak lehetnek aszerint, hogy milyen típusú végállapotok tartoznak az adott „ablak”-ba (lásd 4. ábrát).

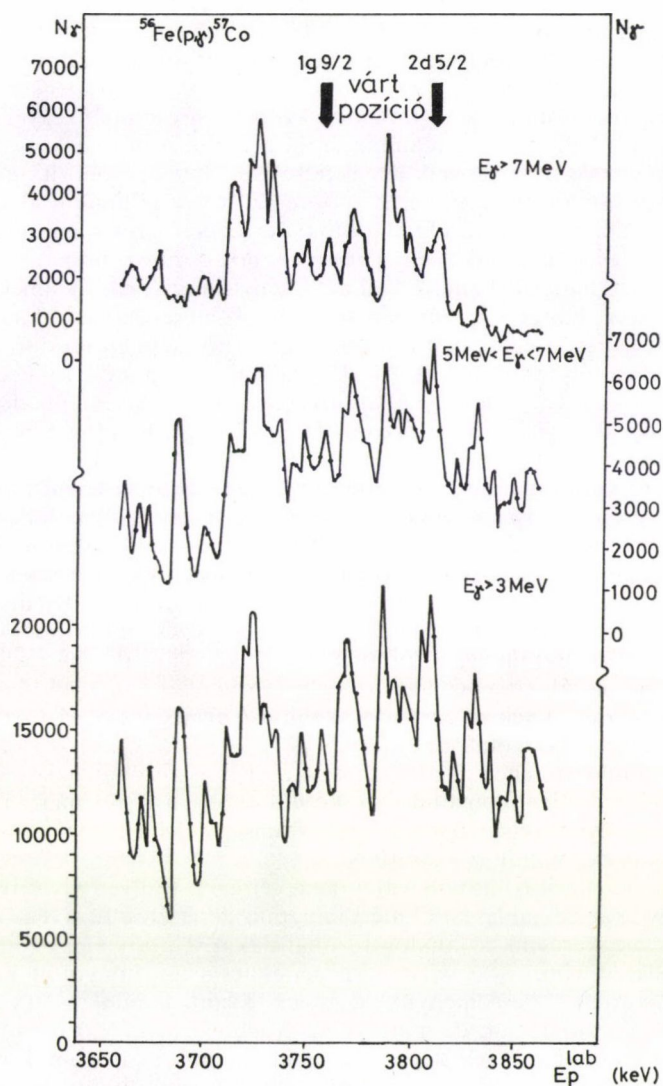
Technikailag az „ablakban” mért gerjesztési függvények mérése úgy történik, hogy a gamma spektrumnak adott energiájú tartományait (pl. $3 \text{ MeV} < E_\gamma < 5 \text{ MeV}$, $5 \text{ MeV} < E_\gamma < 7 \text{ MeV}$ stb.) egy-egy differenciál diszkriminátorral kivágyjuk. (A diszkriminátorok után csatlakozó számlálókkal számoljuk az ide jutó impulzusok számát, azaz a γ hozamot.) Ha több differenciál diszkriminátorunk van, akkor több ablakban is mérhető egyszerre a hozam.

Ezektől a mérésektől azt vártuk, hogy ha nem is minden „ablakban” jelentkezik analóg rezonancia, de nagy valószínűséggel találunk olyan „ablakokat”, ahol az IAR erősségével kitűnik majd a környező rezonanciák közül. A 7. ábrán láthatunk ilyen „ablakban” mért gerjesztési függvényeket a $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció esetében (Fodor 1978).

Az ábrából világosan kitűnik, hogy ezek a gerjesztési függvények nem alkalmasak az analóg rezonanciák helyének a meghatározására. Az $E_\gamma > 7 \text{ MeV}$ küszöb értékhez tartozó függvény menetéből gyanítható az analóg rezonanciák tartománya, de olyan egyértelmű felvilágosítást nem nyújt amint azt az 5. ábrán láttuk.

Mi az oka annak, hogy az előttünk álló kép ilyen áttekinthetetlen? A legfontosabb tényező, amivel ezt magyarázni lehet, a mag nívósűrűsége. Olyan gerjesztési energia tartományokban, ahol nagy a nívósűrűség, azaz kicsi a nívók egymástól mért átlagos távolsága, a keresett analóg rezonancia mellett több, más típusú rezonancia is jelen lehet. Ha csak a proton és a gamma csatorna nyitott (egyéb részecske bomlási küszöb alatt vagyunk), általában elég nagy gamma bomlási valószínűség jut egy-egy rezonanciára. Ez azt jelenti, hogy a gamma gerjesztési görbén több rezonancia is megjelenhet. A különféle rezonanciák természetesen különböző végállapotokat populálnak, és ezek az analóg rezonanciából jövő γ átmenetekkel vetekednek. Amikor tehát a gamma hozamot energia tartományokra határoztuk meg az „ablakokban” és nem tettünk különbséget a végállapotok között, azt találtuk, hogy az analóg rezonancia és más típusú erős rezonanciák együttesen a 7. ábrán látható bonyolult képet eredményezték. Ilyen esetben nem tudjuk eldönteni, hogy melyik csúcs származik az analóg állapot bomlásából.

Ennek a problémának a megoldására vezettük be a részecske spektroszkópiában már eddig is használatos differenciális gerjesztési függvény meghatározásának módszerét.



7. ábra. A $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció három különböző ablakban mért gerjesztési függvénye abban a bombázó proton energia tartományban, ahol a $g_{9/2}$ és $d_{5/2}$ izobár analóg állapotok megjelenését várjuk

c) Differenciális gerjesztési függvény

Láttuk, hogy a kis nívósűrűségű magtartományok esetén az analóg rezonancia erőssége és helye egyértelműen segítettek azonosítani az állapotot. Nagy nívósűrűségű tartományokban viszont ezt tovább már nem remélhetjük, mert az integrális „ablakban” több rezonancia is megjelenhet egyszerre, azonos erősséggel egymáshoz közel.

Ilyenkor sem a rezonancia γ bomlásának intenzitása, sem a pozíciója nem segít abban, hogy a rezonanciát azonosítani tudjuk a keresett analóg állapottal (lásd a már említett 3. és 7. ábrát).

Az eddig elmondottak azt a látszatot keltik, hogy csupán egy kísérleti, vagy technikai feladatot kell megoldani ahhoz, hogy a vázolt nehézségek mellett is lehetőség nyíljon az analóg rezonanciák megkeresésére, illetve azonosítására. Látszólag kísérleti módszerre van szükség, de a valóság az, hogy az analóg állapotok és a γ bomlás folyamatában résztvevő végállapotok szerkezetét, ezek kapcsolatát és a reakcióban játszott szerepüket kellett elméletileg tisztázni ahhoz, hogy a feladatot megoldjuk. Ehhez még hangsúlyoznunk kell azt a tényt, hogy nem új elméletek kidolgozására volt szükség, hanem saját és mások többéves mérési tapasztalatainak elméleti interpretációját kellett megtalálnunk. Ennek eredményeképpen adódott az a módszer, amellyel a kutatást folytatni lehetett. Az alábbiakban ezt a gondolatmenetet követjük.

Tudjuk, hogy az izobár analóg állapotok egyszerű szerkezetű ún. doorway típusú állapotok, illetve doorway típusú rezonanciák. Hullámfüggvényükben első közelítésben egy bizonyos zárt törzsön kívül a két részecske — egy lyuk ($2p - 1h$) bonyolultsági fokozatú komponensnél bonyolultabb gerjesztést nem tételezünk fel. A gamma bomlás operátora viszont egyrészecske-operátor, ami olyan állapotok között képes átmenetet létrehozni, amelyek egynél több nukleon kvantumszámaiban nem különböznek egymástól. A gamma átmenetet létrehozó operátornak ez a tulajdonsága determinálja azokat a végállapotokat, amelyeket az analóg rezonancia γ bomlása során kitüntet (lásd Fodor 1973). Ez azt jelenti, hogy az izobár analóg rezonancia nem egyforma valószínűséggel populálja a végmagnak bármely gerjesztett állapotát, hanem kiválasztja azokat az energia nivókat, amelyek hozzá hasonló egyszerű szerkezetűek. Ezek az egyrészecske típusú gerjesztések, vagy a maximálisan $2p - 1h$ konfiguráció bonyolultságú állapotok.

Hasonló gondolatmenet alkalmazható az analóg rezonanciák tartományában jelentkező egyéb, esetleg bonyolult szerkezetű, közbenső rezonanciákra is. Ezek bomlásuk során olyan végállapotokat választanak, amelyek nem egyszerű, hanem hozzájuk hasonló bonyolult szerkezetűek.

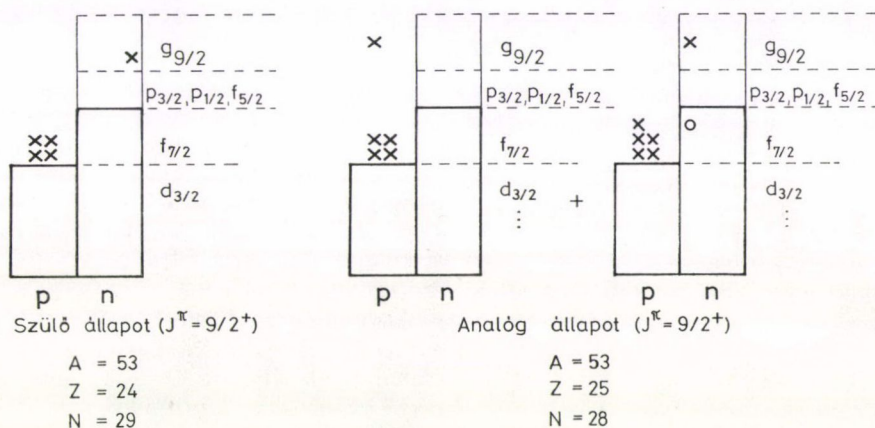
Már az eddigiekből is kitűnik, hogy nem célravezető ilyen viszonyok között az integrális, vagy akár az „ablakban” mért integrális gerjesztési függvény mérése abból a célból, hogy megkeressük az analóg rezonanciákat. Ha a kiválasztott „ablakban” többféle végállapot van, — egyrészecske gerjesztés vagy bonyolult konfigurációjú állapotok egyszerre — eredményül komplex képet kapunk. Az „ablak” jelzi ugyan az analóg rezonanciát, de mellette megjelennek olyan közbenső rezonanciák is, amelyek az „ablakban” jelenlevő bonyolult állapotokkal vannak rokonságban. Ezért a sok rezonancia közül (lásd a 7. ábra) csak nagyon hosszadalmas munkával lehet kiválasztani az analóg állapotokat.

Megállapíthatjuk, hogy az eddig alkalmazott gerjesztési függvény mérési módszerek nem kielégítőek, nem alkalmasak az analóg rezonanciák megkeresésére. Célunk eléréséhez szükséges az egyes magnívókra mint végállapotokra külön-külön felvett gerjesztési függvények ismerete. Ezzel egyidejűleg ismernünk kell a nivók szerkezetére vonatkozó információkat ahhoz, hogy eldönthessük, mely végállapotok jöhetnek szóba az analóg rezonancia keresésénél. Más szavakkal fogalmazva, az eddigi integrális típusú gerjesztési függvények helyett meg kell szerkesztenünk a mért γ spektrumok alapján a különböző végállapotokra vezető gerjesztési függvényeket külön-külön. Ezt nevezzük differenciális típusú gerjesztési függvénynek.

Az új mérés technika abban áll, hogy a vizsgálni kívánt bombázó- energiatartományban megfelelően finom lépésekben, pontról pontra megmérjük a teljes γ spektrumot. A spektrumok kiértékelése alapján konstruáljuk meg az egyes átmenetekre vonatkozó gerjesztési görbéket.

d) Speciális végállapotok

Ha az analóg állapot szerkezete olyan, hogy benne a proton magas pályamomentumú állapotban van, természetesen a rezonancia állapot spinje is nagy értékű lesz. Legyen a rezonanciát létrehozó protonok pályamomentuma $l=4$, ekkor $g_{9/2}$ vagy $g_{7/2}$ analóg állapotról beszélünk. Az analóg állapot hullámfüggvényének szerkezetét $A=53$ esetén a 8. ábra mutatja. Ezt a szerkezetet kell figyelembe vennünk amikor



8. ábra. Szülő állapot és analóg állapot hullámfüggvényének szerkezete héjmodell képben $g_{9/2}$ analóg rezonancia esetén az $A=53$ tömegszámú magban

azt a speciális végállapotot keressük a γ bomlásban, amelyik a legközelebbi rokon-ságban van az analóg rezonanciával, vagyis ehhez a legnagyobb hasonlóságot mutatja.

Az analóg állapot szerkezetének megfelelő, ahhoz teljesen hasonló szerkezettel rendelkezik az antianalóg állapot. Hullámfüggvényében ugyanazok a komponensek szerepelnek — egy fáziskülönbségtől eltekintve — mint a 8. ábrán látható analóg állapotéban, eltérés csak az izospin kvantumszámban van. Az antianalóg állapot rendszerint a kötött állapotok tartományába esik. Az antianalóg állapotok is több gerjesztett állapotra felhasadva jelenhetnek meg, amint az a stripping és pick up reakciók vizsgálatából ismeretes. A szomszédos állapotokkal való kölcsönhatás okozta keveredés eredményeképpen hullámfüggvényeikben bonyolultabb komponensek is szerepet játszanak, tehát az analóg rezonancia nem képes erőteljesen populálni ezeket a végállapotokat. Ilyen esetekben gyenge M1 átmeneteket figyelhetünk meg (Fodor 1974). Amikor az antianalóg állapot nem hasad fel, hanem mint egyetlen erős egyrészeske gerjesztés létezik a kötött állapotok között, az analóg állapot γ bomlását döntő mértékben befolyásolja. Ekkor az analóg egy igen erős izo-

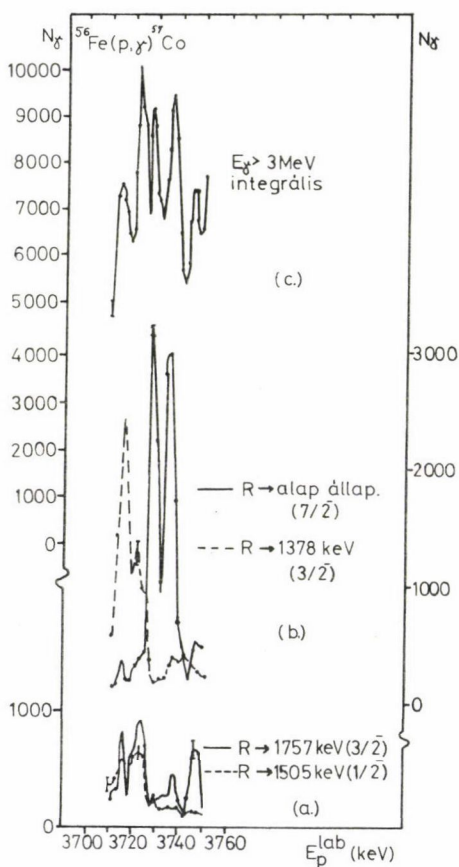
vektor M1 γ átmenettel bomlik az antianalóg állapotba. Ezt az átmenetet nemcsak a majdnem egy Weisskopf egységnyi erősség jellemzi, hanem az elágazási arány is, amely 70—80% erre az átmenetre vonatkozóan. Lásd a $^{58}\text{Ni}(p, \gamma)^{59}\text{Co}$ reakcióban talált $g_{9/2}$ rezonancia esetét az 5. ábrán. Ebben az esetben előfordulhat, hogy az integrális típusú gerjesztési függvény is kimutatja az analóg állapot helyét.

Hogyan keressük ki a megfelelő végállapotot a gamma csatornában, ha az anti-analóg állapot nem áll rendelkezésünkre? Tudjuk azt az elektromágneses átmenetekről, hogy bizonyos izoskalár kollektív E2 átmenetektől eltekintve, legnagyobb valószínűséggel a dipól átmenetek valósulnak meg. Meg kell tehát találnunk azokat a dipól átmeneteket, amelyek számításba jöhetnek az izobár analóg állapotok γ bomlásában. Az izovektor M1 átmeneteket már említettük, ahol a végállapot spin és paritás értékei azonosak a kezdeti állapotéval. E1 átmenet jöhet létre olyan állapotok között, ahol a kezdeti és végállapot impulzus momentumaira érvényes az alábbi egyenlőtlenség

$$|\vec{J}_i - \vec{J}_f| \leq 1 \leq |\vec{J}_i + \vec{J}_f|$$

és a kezdeti állapot paritása nem egyezik meg a végállapotéval. Ha az analóg rezonancia spin értéke pl. $J^\pi = 9/2^+$ akkor a $J^\pi = 7/2^-, 9/2^-$ és $11/2^-$ spin és paritású végállapotokra vezet E1 átmenet.

A közepesen nehéz magok tartományában, ahol az $f_{7/2}$ héj a protonokra vonatkozóan még nem zárt, páratlan Z érték esetén az alapállapot $J^\pi = 7/2^-$ spin paritású. Ez az alapállapot ugyanazt a törzs konfigurációt tartalmazza, mint az analóg rezonancia. A különbség abban van, hogy a zárt törzsön kívül elhelyezkedő proton itt más héj-modell állapotban tartózkodik. Minden valószínűség szerint az a γ átmenet, amely erre a nívóra vezet, érzékeny lesz az analóg rezonanciára, mert az analóg rezonancia környezetében található kis spinű, komplikált szerkezetű állapotok erre a végállapotra már a nagy spin különbség miatt sem bomlanak. Mérési eredményeink ezt a megfontolást alátámasztották és valóban szép példákat találtunk erre vonatkozóan. A 9. ábrán láthatjuk az általunk vizsgált $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakciónak egy szűk bombázó energiatartományban mért differenciális gerjesztési függvényét 4 különböző γ átmenetre vonatkozóan és mellette az összehasonlításhoz feltüntetett integrális gerjesztési



9abc ábra. A $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció differenciális gerjesztési függvénye négy különböző átmenetre. A reakció integrális gerjesztési függvénye $E_\gamma > 3$ MeV küszöb energia esetén

tési görbét. Az analóg rezonancia két komponensre felhasadva jelenik meg a ^{57}Co mag alapállapotára vezető E1 gamma átmenet gerjesztési függvényében. Ebben az esetben az alapállapot az az egyszerű szerkezetű végállapot, amely az analóg rezonanciával a legközelebbi rokonságban van.

e) Elágazási arányok

A differenciális gerjesztési görbék módszere nemcsak az analóg állapotok pozíciójának felismerésére alkalmas, hanem ezen túlmenően egy igen fontos fizikai mennyiségnek a pontos meghatározását is lehetővé teszi. Ez a mennyiség a rezonancia gamma bomlásának elágazási aránya, amely megmondja, hogy az adott rezonancia a különféle lehetséges végállapotokat milyen valószínűséggel populálja.

Az elágazási arányok meghatározására az irodalomban — és általunk is — eddig használt módszer az volt, hogy az integrális gerjesztési görbén talált rezonancia csúcson megmértük a gamma spektrumot. Egy másik spektrumot mértünk a rezonancián kívül, amelyet mint háttérrel fogadtunk el, és ennek alapján számítottuk ki az első spektrumból az elágazási arányokat.

A differenciális gerjesztési függvények megtanítottak arra, hogy ez a módszer csak ott alkalmazható, ahol a nívósűrűség kicsi. Ebben az esetben az egyes rezonanciák egymástól elég távol vannak ahhoz, hogy a rezonancia csúcson (adott kísérleti felbontással) mért γ spektrumban csak azok az átmenetek jelenjenek meg, amelyek ebből a vizsgálni kívánt rezonanciából származnak. Ahol a nívósűrűség nagyobb, ott nem elég az említett két spektrum ismerete. Rendelkezésünkre áll azonban a differenciális gerjesztési görbe, amelynek alapján összegyűjthetők azok a γ átmenetek, amelyek adott bombázó energiáknál rezonanciát mutatnak. Ezeket, mint egy rezonanciából származó átmeneteket kezeljük, és belőlük határozzuk meg az elágazási arányokat. Azokat az átmeneteket, amelyek jelen vannak ugyan a rezonancián mért γ spektrumban, de itt sima energiafüggést mutatnak, nem vesszük be a rezonanciából származó átmenetek közé.

Szép példát láthatunk erre a 9b ábrán, ahol a végmag alapállapotára [$R \rightarrow$ alapállapot ($7/2^-$)] vezető γ átmenetben található két erős rezonancia helyén az $E_x = 1378$ keV végállapotra [$R \rightarrow 1378$ keV ($3/2^-$)] vezető γ átmenet sima energiafüggést mutat. Az ábrából azt is látjuk, hogy ez utóbbi γ átmenet kb. 3718 és 3720 keV-nél az alapállapot átmenetben talált két rezonancia helyénél alacsonyabb energiánál mutat rezonanciát. Hasonlóan viselkedik az 5a ábrán látható két másik γ átmenet is. Ezek az analóg rezonanciánk szomszédságában elhelyezkedő valamilyen más típusú rezonanciából (valószínűleg $J_R^\pi = 3/2^{(\pm)}$ vagy $5/2^{(\pm)}$ spinű) származnak. Az analóg rezonancia γ elágazási arányainak kiszámításánál ezeket nem vettük figyelembe. Mérési eredményeink részletes bemutatásánál adjuk meg az analóg állapotokra meghatározott γ elágazási arányokat.

f) A módszer előnyei és korlátai

Az alkalmazott módszernek természetesen vannak korlátai. Korlátot szab az átlagos nívótávolság, amely a magszerkezettől függ, és a gerjesztési energiával változik. Ezzel kapcsolatos kísérleti energiafelbontásunk. A differenciális típusú gerjesztési görbék felvétele céljából kompromisszumot kell kötnünk. Egyrészt megfelelő mennyiségű impulzust kell gyűjtenünk a γ spektrum minden fontos átmenetére vonatkozóan, másrészt szükséges, hogy egy ponton a mérés ne tartson túl sokáig. Ehhez minél vastagabb céltárgy alkalmazása lenne jó. A jó statisztika ellen dolgozik azonban a céltárgyak megengedhető vastagsága. A rezonanciáknak az egymástól való minél tökéletesebb elkülönítése céljából vékony céltárgyakat kell használnunk, hogy azokat energiában ne integráljuk össze. (Itt a közbenső mag állapotainak összeintegrálásáról beszélünk!) Nincs értelme viszont annak, hogy a gyorsított nyaláb energia szórásánál vékonyabb céltárgyakat alkalmazzunk, mert a nyaláb energia ingadozásán belül ez az összeintegrálás elkerülhetetlen. Ezen megfontolások figyelembevételével az általunk alkalmazott kísérleti energia felbontás $\sim 2-2,5$ keV volt, amit a céltárgy vastagság és a nyaláb energia szórása szabott meg. Így a gerjesztési függvény 1 pontjának mérése kb. 3–4 óra. Ennek ellenére sikerült meghatározni az analóg rezonancia pozícióját a ^{53}Mn magban olyan gerjesztési energia tartományban, ahol az általunk kísérletileg meghatározott átlagos nívótávolság (spinekre való tekintet nélkül) $D = (1,0 \pm 0,3)$ keV volt. Ebben azonban az analóg rezonanciának nagy spin értéke ($J^\pi = 9/2^+$) is szerepet játszott.

Az általunk használt 2 keV vastagságú céltárgyak a $g_{9/2}$ rezonanciákra vonatkozóan vastag céltárgynak számítanak, mert ezek teljes szélessége az eV-os nagyságrendbe esik (lásd pl. az erős $g_{9/2}$ IAR a ^{59}Cu magban $\Gamma_t \sim 35$ eV szélességgel) (Arai 1976). Ezért alkalmaztuk az átmeneti erősségek kiszámítására az általunk vizsgált minden esetben az alábbi formulát:

$$\frac{2\varepsilon}{\lambda^2} Y(\infty, \infty) = \frac{(2J+1)}{(2i+1)(2J_0+1)} \frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{\Gamma_t}, \quad \text{I.1.}$$

ahol ε a céltárgy anyagára jellemző energia veszteség keV cm²/atom dimenzióval, λ^2 az E_p bombázó energiával rendelkező protonok hullámhossza, cm² dimenzióval, $Y(\infty, \infty)$ a γ hozam a rezonanciánál vastagabb céltárgy esetén, i a bombázó részecske spinje, J_0 a céltárgy mag spinje, J a végállapot spinje, Γ_p a rezonanciának proton befogás, illetve elbomlásra vonatkozó szélessége, Γ_γ a rezonanciának az adott átmenetre vonatkozó szélessége, Γ_t a rezonancia teljes szélessége.

Az átmeneti erősségekből kell meghatároznunk a Γ_γ abszolút átmeneti valószínűségeket. Ehhez szükséges lenne a Γ_p és Γ_t értékek ismerete. Minthogy a rugalmas proton szórás a ^{63}Cu és ^{56}Fe céltárgyak esetében nem mértük és nem is analizáltuk, sem mások méréseiből ez az adat nem állt rendelkezésünkre, csak feltevésekre szorítkozhattunk a Γ_p és Γ_t mennyiségek arányára vonatkozóan. Tekintettel arra, hogy a neutron csatorna — egyéb részecske bomlási csatornákkal együtt — ezen a bombázó energián még zárt, valójában csak a rugalmatlan proton szórás játszik szerepet. A γ spektrumok tanúsága szerint ez az érték nem jelentős. Feltételeztük, hogy a Γ_t teljes szélességet a Γ_p proton szélesség határozza meg. Így a Γ_p/Γ_t arányt 1-nek véve számítottuk ki a Γ_γ értékeket. Valójában ezek így alábecsült értékek, de 30%-os hibánál nagyobbakat nem követhettünk el. A ^{52}Cr céltárgy mag esetében más eljárást követtünk.

Módszerünk előnye a rugalmas proton csatornával szemben a nagy spinű analóg állapotokra vonatkozóan az, hogy a γ csatornában a penetráció miatt nincs korlátozva a bomlás, sőt az elektromágneses átmenetekre érvényes kiválasztási szabályok segítenek a végállapotok szelekciója által az analóg állapot fellelésében.

Mondhatnánk úgy is, hogy a kétféle módszer egymásnak kiegészítője az analóg állapotok kutatásában. A kis pályamomentumú rezonanciák ($l=0, 1, 2$) megtalálása a rugalmas proton szórásban könnyebb, míg a nagy l értékű ($l=3, 4$) rezonanciák megkeresésére a γ csatorna alkalmasabb.

Természetesen a csatornák közötti korreláció vizsgálatához szükséges lenne egy-egy analóg rezonanciát az összes lehetséges bomlási csatornában egyszerre megvizsgálni. Ez azonban nem mindig megoldható feladat.

A differenciális típusú gerjesztési függvény mérése az első lépés az analóg rezonanciák felkutatásában a γ csatorna esetén. Második lépésként a gerjesztési függvénynek olyan csúcsain, ahol nagy valószínűséggel az analóg állapottal van dolgunk, szögeloszlás mérést végzünk. Ekkor a végállapot spin és paritás értékének ismeretében meghatározhatjuk az őt populáló rezonancia megfelelő paramétereit. A rezonancia spin értéke a szögeloszlás méréséből nyerhető, a paritás értékét elméleti megfontolások segítségével (pl. héjmodell) kizárásos alapon kaphatjuk meg. Mindezek figyelembevételével a rezonancia spin, paritás értékei, valamint pozíciója alapján (amelyet az analóg állapotokra a $\Delta E_c = 1,444 \frac{Z}{A^{1/3}} - 1,13$ MeV félempirikus Coulomb energia képlet segítségével előre kiszámítunk) az analóg állapot azonosítását elvégezhajtuk.

II. fejezet

KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK

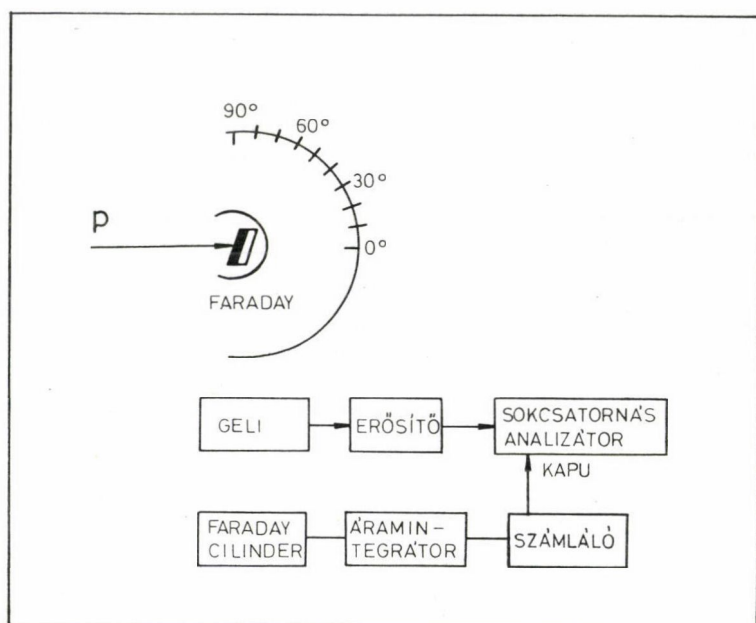
Mérési elrendezés

Méréseinket a KFKI EG—2R Van de Graaff generátorával végeztük. Méréseink kísérleti megvalósításának elvét a 10. ábrán láthatjuk. A kamrába beérkező proton nyaláb a Faraday cilinderral körülvelt céltárgyat a geometriai középpontban éri el. A nyaláb kollimálását a céltárgytól kb. 100 cm-re levő $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$, és egy kb. 40 cm-re levő $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ rés rendszer definiálja. A nyalábot minden esetben a céltárgyra fókuszáljuk.

A gerjesztési függvényeket a 90° -ban elhelyezett Princeton Gammatech típusú, (^{60}Co $E=1,33$ MeV vonalra $2,2$ keV felbontású, 75 cm^3 térfogatú) GeLi detektorral mértük. A GeLi detektor jeleit erősítőn keresztül egy Canberra típusú sokcsatornás analízátorba vezettük, amely a γ spektrumok mérésére szolgált. Egy-egy spektrumot 2048 csatornában mértünk kb. 6 keV/csatorna felbontással. A spektrumokat a beérkező töltésre normáltuk. Egy-egy jó minőségű γ spektrumhoz $4 \cdot 10^3 - 1 \cdot 10^4 \mu\text{C}$ begyűjtése volt szükséges. A mérésnél a céltárgy minőségétől függően $0,3 - 0,5 \mu\text{A}$ áramerősségű proton nyalábot használtunk.

Céltárgyainkat Au tartólapra vákuumpárooltuk vagy elektrolizáltuk, vastagságuk általában 2 keV volt.

A mért γ spektrumokat az ELTE Atomfizikai Tanszékén Deák Ferenc által a TPA-i kiszámítógépre kidolgozott program segítségével értékeltük ki.



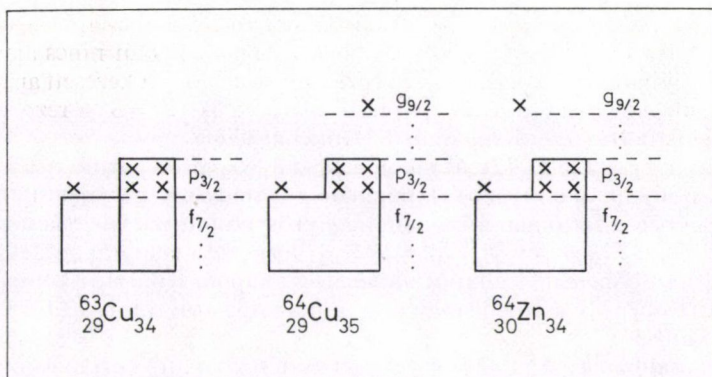
10. ábra. Mérési elrendezés a (p, γ) reakciók tanulmányozására

A $^{60}\text{Ni}(\alpha, p_0)^{63}\text{Cu}$ magreakció vizsgálata a Saclay-i tandem generátorral történt. Ennek a mérésnek az elvégzéséhez ugyanis $E_\alpha = 7,2\text{--}7,5$ MeV bombázó energiára volt szükség. A proton detektor ebben az esetben felületi záróréteges szilícium detektorokból épített teleszkóp volt, amelyhez részecske azonosító elektronika, és végül sokcsatornás analízátor csatlakozott.

A) A $^{63}\text{Cu} + p$ rendszer vizsgálata

A ^{63}Cu mag szerkezete eltér a céltárgy magoknak az IAR-ek vizsgálatánál megszokott szerkezetétől, amelyek rendszerint páros-páros magok. Ebben a magban a protonok száma páratlan, és ennek az utolsó páratlan nukleonnak a kvantumszámait határozzák meg a mag alapállapotához tartozó spin és paritás értéket, ami ebben az esetben nem $J^\pi = 0^+$ mint a páros-páros magoknál. A ^{63}Cu mag utolsó protonja a $2p_{3/2}$ héjmodell pályán helyezkedik el, és így a mag alapállapotának spin és paritás értéke $J^\pi = 3/2^-$.

Méréseink célja a $g_{9/2}$ izobár analóg rezonancia megtalálása volt a $^{63}\text{Cu} + p$ rendszerben, azaz a ^{64}Zn magban. A 11a ábrán a ^{63}Cu mag alapállapotát látjuk a héjmodell szerinti interpretációban. Ha ehhez a rendszerhez úgy adunk hozzá egy proton, hogy azt a $g_{9/2}$ pályára helyezzük el, akkor a ^{64}Zn magnak így kialakult gerjesztett állapotát a 11c ábrán feltüntetett sematikus kép reprezentálja. Az állapot eredő impulzuszómomentumát és paritását a két egyrészecske konfiguráció lehetséges csatlódásai határozzák meg, mert a páros-páros zárt törzs ebben nem játszik szerepet.



11. ábra. $^{63}_{29}\text{Cu}_{34}$ mag alap, a $^{64}_{29}\text{Cu}_{35}$ és a $^{64}_{30}\text{Zn}_{34}$ magok gerjesztett $g_{9/2}$ állapotainak héjmodell szerinti szerkezete

Ez a $(p_{3/2} \otimes g_{9/2})J^\pi$ direkt sorozatnak megfelelően $J^\pi = 6^- 5^- 4^- 3^-$ lehet. Ilyen szerkezete lehet a $g_{9/2}$ izobár analóg rezonanciának (természetesen a $2p-1h$ azaz 2 részecske — 1 lyuk konfigurációval bővítve) és a $g_{9/2}$ antianalóg állapotoknak is.

A megfelelő szülő állapotot, ahol a $g_{9/2}$ egyrészecske állapotban egy neutron helyezkedik el a ^{64}Cu magban kell keresnünk (lásd a 11b ábra). Köztudomású, hogy ezeket a neutron egyrészecske állapotokat a (d, p) stripping reakciókban a legkönnyebb megtalálni. Az irodalomból (Park and Daenick 1969) ismeretes ilyen mérés, ahol a ^{64}Cu magban $E_x = 1,546$ MeV és 1,589 MeV gerjesztési energiáknál találtak olyan nívókat, ahova $l_n = 4$ pályamomentummal történt a neutron transzfer, és az ezen gerjesztett állapotok impulzusmomentumára és paritására $J^\pi = 3^-$ fogadtak el. A talált spektroszkópiai faktorok, azaz a neutron egyrészecske konfiguráció erősségei: $(2J+1)S_n = 3,68$ és 6,34 erre a két gerjesztett állapotra (meglepően nagyok).

A Coulomb eltolódási energiának $\Delta E_c = \left(1,444 \frac{Z}{A^{1/3}} - 1,13\right)$ MeV félempirikus becslése alapján ezen állapotok analógjait a ^{64}Zn magban $E_x = 10,858$ és 10,901 MeV gerjesztési energiáknál kell megtalálnunk. Ez $E_p^{\text{lab}} = 3200$ és 3244 keV bombázó proton energiát jelent, ha az állapotokat olyan reakciókban akarjuk megtalálni, ahol a bemenő csatorna a $^{63}\text{Cu} + p$ rendszer.

A $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ magreakció

A $g_{9/2}$ IAR megtalálása a ^{64}Zn magban a (p, γ) reakció tanulmányozásán keresztül történt (Fodor 1976).

Tekintsük a $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ magreakciónak az előbbieken részletesen tárgyalt differenciális típusú gerjesztési görbáját, mint azt a 12. ábrán láthatjuk. A gerjesztési függvények mérésénél 2 keV vastagságú céltárgyat használtunk, és 2 keV-es lépésekben megmértük a teljes γ spektrumot; $E_p = 3150-3270$ keV bombázó energiatartományban. Az ábrán három érdekes és fontos végállapotra vonatkozó gerjesztési függvényt látunk. A 12a ábra a kontinuumból az alapállapotra érkező gamma sugárzás energia függését mutatja a bombázó energiatartományban. Feltűnő, hogy 3200

és 3260 keV bombázó energiák közötti tartományban az alapállapotra vezető γ átmenet intenzitása háttér szintre esik le. Ebben a tartományban nincs alapállapotú γ átmenet. Ez összhangban van azzal az elképzelésünkkel, hogy a keresett analóg állapot $J^\pi=3^-$ impulzusmomentumú és paritású állapot. A $J^\pi=3^-$ rezonanciából a $J^\pi=0^+$ alapállapotra vezető sugárzás E3 átmenet lenne.

Figyeljük meg a 12b és 12c ábrákon a $J^\pi=3^-$ spin és paritás értékkel rendelkező végállapotokat, illetve azokat populáló γ átmenetek gerjesztési függvényeit. Ezek éppen ebben a tartományban mutatnak erősebb intenzitású csúcsokat. A ^{64}Zn magban $E_x=2,982$ MeV és $E_x=3,002$ MeV gerjesztési energiáknál fekvő $J^\pi=3^-$ nívókat a $g_{9/2}$ izobár analóg állapot antianalóg állapota felhasadt komponenseinek tekinthetjük. Ebben az esetben analóg \rightarrow antianalóg izovektor ($\Delta T=1$) M1 γ átmenetekről van szó.

Legvilágosabban az $E_x=3,002$ MeV gerjesztett állapotra vezető gamma átmenet gerjesztési függvénye mutatja az IAR, illetve komponensei helyét. Az $E_p^{\text{lab}}=3217$ és $E_p^{\text{lab}}=3251$ keV-nél feltűnő két erős rezonancia feltételezésünk szerint a $g_{9/2}$ IAR komponensei. Ehhez azt kell belátnunk, hogy energiájuk egyezik az előre becsült értékkel, és hogy spin és paritás értékük valóban $J^\pi=3^-$. Ennek bizonyítékai:

a) A rezonanciák pozíciója $E_p=3217$ és 3251 keV, és ez jól megegyezik az előre számított értékkel.

b) Jó egyezésben van az elméletileg számított aszimmetriákkal az egyes γ átmenetekre megmért $I(0^\circ)/I(90^\circ)$ aszimmetria a rezonanciákra feltételezett $J_R^\pi=3^-$ spin és paritás hozzárendeléssel (lásd az I. táblázatot), amely az $E_p=3251$ keV bombázó energiánál mért értékeket foglalja össze.

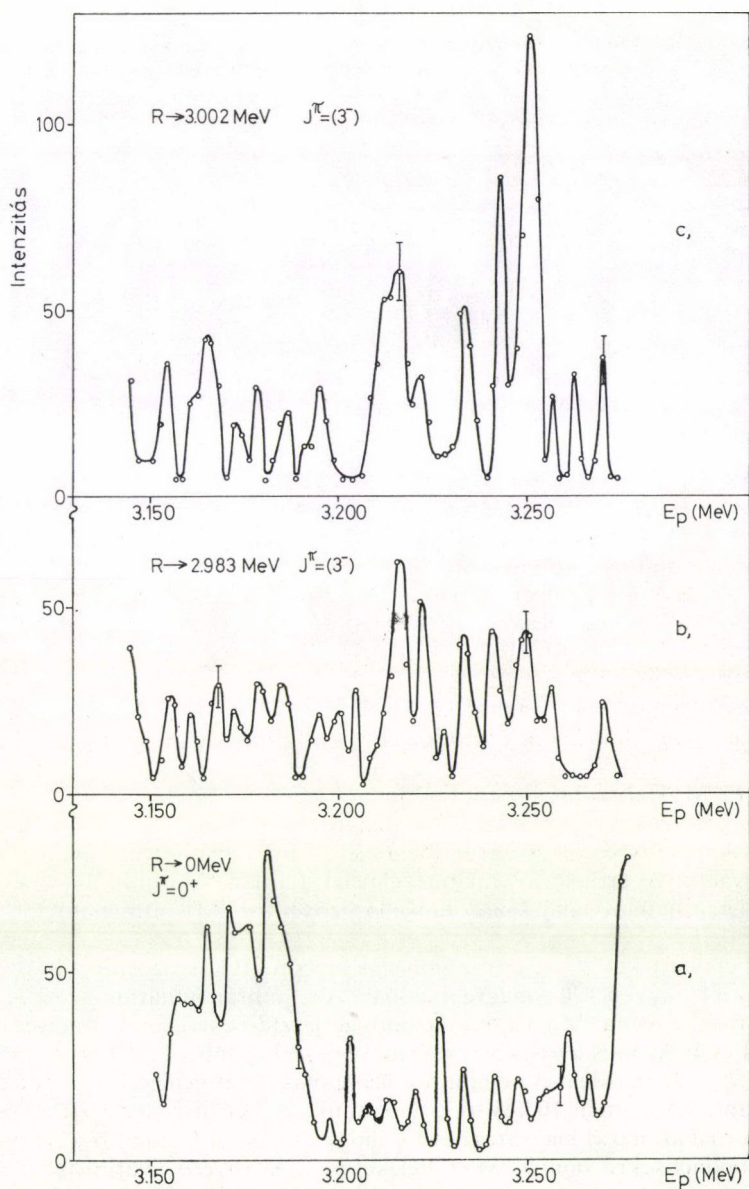
c) Mindkét rezonancia γ spektruma azt mutatja, hogy a $J_f^\pi=2^+$ és 3^- spin és paritás értékű végállapotokat populálják viszonylag nagy erősséggel, míg a többi gerjesztett állapotot csak igen gyengén (lásd a II. táblázatot). Ez E1 és M1 átmenete-

I. TÁBLÁZAT

A ^{64}Zn mag négy különböző gerjesztett állapotára vezető γ átmenetekre számított és mért aszimmetriák és a mért abszolút átmeneti valószínűségek Weisskopf egységekben, különféle rezonancia spineket tételezve fel

E_x MeV végmag	J^π vég	J^π res	$I(0^\circ)/I(90^\circ)$ (elm.)	$I(0^\circ)/I(90^\circ)$ (kísér.)	Γ_γ (W. u.) *
0,992	2^+	3^+	0,67	$0,84 \pm 0,13$	$4,3 \times 10^{-3}$ M1
		3^-	0,64		$0,8 \times 10^{-4}$ E1
		4^-	1,70		3,8 M2
1,800	2^+	3^+	0,67	$0,82 \pm 0,17$	$2,2 \times 10^{-3}$ M1
		3^-	0,64		$0,4 \times 10^{-4}$ E1
		4^-	1,70		2,6 M2
2,982	3^-	3^+	1,52	$1,33 \pm 0,25$	$1,9 \times 10^{-5}$ E1
		3^-	1,79		$0,9 \times 10^{-3}$ M1
		4^-	0,44		$0,9 \times 10^{-3}$ M1
3,002	3^-	3^+	1,52	$1,39 \pm 0,20$	$0,9 \times 10^{-4}$ E1
		3^-	1,79		$5,0 \times 10^{-3}$ M1
		4^-	0,44		$5,0 \times 10^{-3}$ M1

* A Γ_γ abszolút átmeneti valószínűségek az M2 átmenet lehetőségét kizárják, így tehát a 4^- spin és paritás értéket. A 3^+ és 3^- spin és paritás értékek között így nem lehet különbséget tenni, de feltételeztük, hogy egy $J^\pi=3^+$ állapot kialakulásához bonyolultabb konfiguráció kellene, amely nem az antianalóg-állapotot populálná bomlásnál.



12. ábra. A $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ magreakció gerjesztési függvénye a) az alapállapotra, b) az $E_x = 2,982 \text{ MeV}$ és c) az $E_x = 3,002 \text{ MeV}$ nivókra vezető γ sugárzásokra vonatkozóan, $E_p = 3145\text{--}3275 \text{ keV}$ bombázó proton energiatartományban, 2 keV-es lépésekben mérve

II. TÁBLÁZAT

Az analóg rezonanciákból a ^{64}Zn mag különböző gerjesztett állapotaira vezető γ sugárzások erősségei és az abszolút átmeneti valószínűségek eV-ban

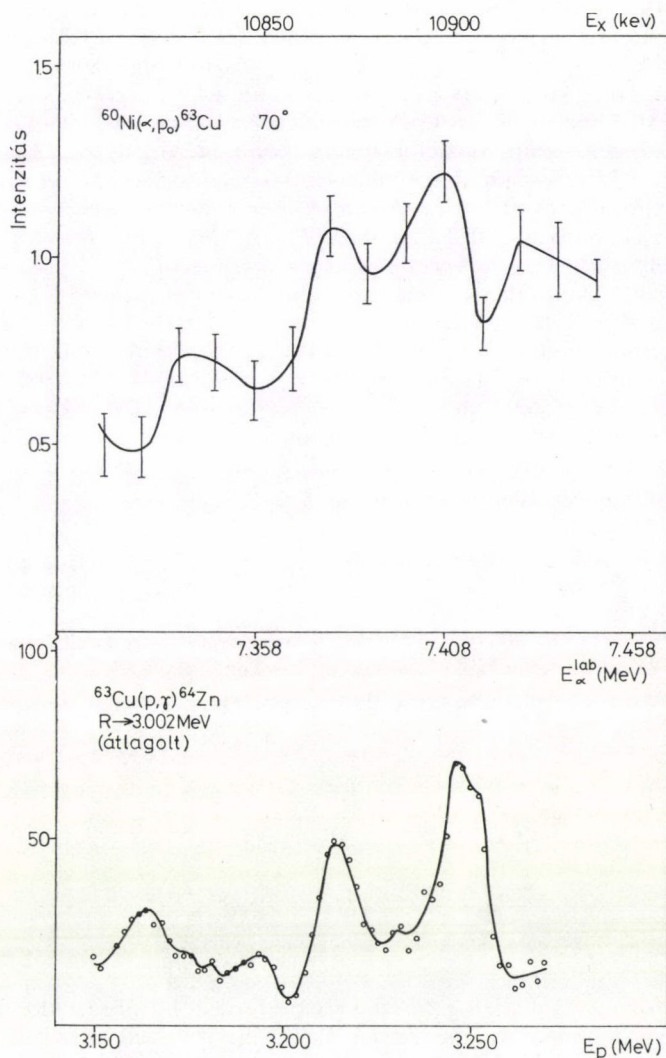
E_x MeV	J^π	$E_p^{\text{lap}} = 3251 \text{ keV}$		$E_p^{\text{lap}} = 3217 \text{ keV}$	
		$\omega \Gamma_p \Gamma_\gamma / \Gamma_t$ (eV)	Γ_γ (eV)	$\omega \Gamma_p \Gamma_\gamma / \Gamma_t$ (eV)	Γ_γ (eV)
0,992	2+	80×10^{-3}	$9,2 \times 10^{-2}$	41×10^{-3}	$4,6 \times 10^{-2}$
1,800	2+	31×10^{-3}	$3,6 \times 10^{-2}$	20×10^{-3}	$2,3 \times 10^{-2}$
2,305	4+	12×10^{-3}	$1,3 \times 10^{-2}$	10×10^{-3}	$1,1 \times 10^{-2}$
2,739		11×10^{-3}	$1,1 \times 10^{-2}$	17×10^{-3}	$1,9 \times 10^{-2}$
2,793		17×10^{-3}	$1,9 \times 10^{-2}$	20×10^{-3}	$2,3 \times 10^{-2}$
2,982	3-	8×10^{-3}	$0,9 \times 10^{-2}$	11×10^{-3}	$1,2 \times 10^{-2}$
3,002	3-	46×10^{-3}	$5,4 \times 10^{-2}$	30×10^{-3}	$3,4 \times 10^{-2}$
3,074	4+	14×10^{-3}	$1,7 \times 10^{-2}$	13×10^{-3}	$1,5 \times 10^{-2}$
3,199		12×10^{-3}	$1,3 \times 10^{-2}$	11×10^{-3}	$1,2 \times 10^{-2}$
3,285		11×10^{-3}	$1,1 \times 10^{-2}$	—	—

ket jelent, ha a rezonancia spin és paritás 3^- . Az abszolút átmeneti valószínűség értékére az alábbiakban még visszatérünk.

d) A két rezonancia éppen abban a gerjesztési függvényben jelenik meg, amely az antianalóg állapotra, illetve — tekintettel annak felhasadt voltára — komponenseire vezető γ sugárzásra vonatkozik. Ford és társai (1967) találtak a $^{63}\text{Cu}(^3\text{He}, d)^{64}\text{Zn}$ magreakcióban $l_p=4$ pályamomentummal gerjesztett két nívót $E_x=2,98$ és $3,08$ MeV energiáknál, amelyekre méréseik szerint a $(2J+1)C^2S$ spektroszkópiai erősség $3,8$ és $2,9$ -nek adódott. Ezek a felhasadt $(p_{3/2} \otimes g_{9/2})3^-$ konfigurációt jelzik.

e) A $\Gamma_\gamma(M1)$ abszolút átmeneti valószínűségek, az analóg \rightarrow antianalóg M1 átmenetekre, amelyeket az erősségekből határoztunk meg, $\Gamma_p \approx \Gamma_t$ feltételezéssel, 10^{-2} Weisskopf egység nagyságrendbe esnek, ami felhasadt antianalóg állapotok esetében kvalitatíve érthető a Maripuu elmélet alapján (Maripuu 1970) és nem tér el az $f_{7/2}-p_{3/2}$ héjban talált más hasonló izovektor M1 átmenetektől (lásd pl. Fodor 1974).

f) Az említett két $J^\pi=3^-$ rezonanciát megtaláltuk az izospin tiltott csatornában is, azaz a $^{60}\text{Ni}(\alpha, p_0)^{63}\text{Cu}$ magreakcióban. A 13. ábrán láthatjuk az (α, p_0) reakció gerjesztési függvényét a ^{64}Zn magban azonos gerjesztési energiánál, amelyet 10 keV-es céltárggyal és 10 keV-es lépésekben mértünk, összehasonlítva a $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ reakciónak az $E_x=3,002$ MeV-es végállapotot populáló γ átmenetének gerjesztési függvényével, amelyet szintén 10 keV-re átlagoltunk. A két nívó gerjesztését az izospin tiltott csatornában azzal magyarázhatjuk, hogy amikor a Coulomb kölcsönhatás az IAR-t komponensekre bontja, azaz belekeveri a környező állapotokba, akkor az már izospinben is kevert lesz, tehát a rezonanciák gerjesztése a $T_<$ komponensen keresztül történt.



13. ábra. A $^{60}\text{Ni}(\alpha, d_0)^{63}\text{Cu}$ és a $^{63}\text{Cu}(p, \gamma_{3,200 \text{ MeV}})^{64}\text{Zn}$ magreakciók gerjesztési függvényei

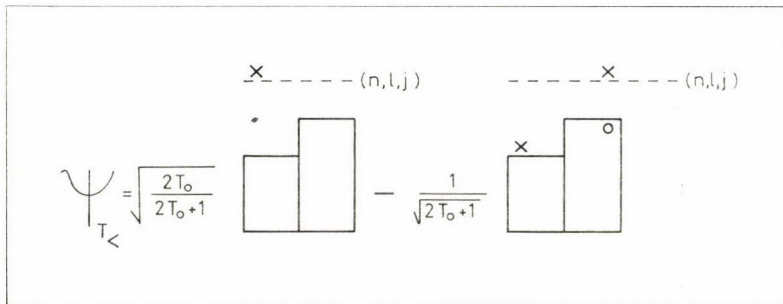
A $g_{9/2}$ IAR- és antianalóg állapotok szerkezete a ^{64}Zn magban

A $^{63}\text{Cu}+p$ rendszerben megtalált $g_{9/2}$ komponensek jelentőségét abban látjuk, hogy értékes magszerkezeti információt tartalmaznak. Alfa és deuteron inelasztikus szórás mérésekből tudjuk, hogy a Ca—Pb magtartományban hol helyezkednek el kvadrupol ($J^\pi=2^+$) és oktapol ($J^\pi=3^-$) kollektív vibrációs gerjesztések (Bern-

stein 1963). Az oktapul gerjesztésekről ismeretes, hogy gerjesztési energiájuk a Ca-tól a Pb-ig a páros-páros magokban kb. $E_x \sim 4$ MeV-től $E_x = 2,6$ MeV-ig folyamatosan csökken. Tudjuk, hogy ezek az állapotok nagy valószínűséggel gerjeszthetők inelasztikus szórásban, ahol kitüntetett szerepet játszanak a környező más szerkezetű állapotokhoz képest. Elméleti elképzelések szerint ezek (lásd pl. Veje 1966) lyuk-részecske gerjesztések koherens szuperpozíciói (egyik komponens pl. $(p_{3/2} \otimes g_{9/2})_{3-}$). Az is ismeretes, hogy a 3^- erősség majdnem teljesen a legalacsonyabban fekvő 3^- állapotra koncentrálódik, amelyről itt most szó van. A mag egészében egy kollektív vibrációt végez ebben az állapotban. A ^{64}Zn magban $E_x \sim 3$ MeV-nél találtak ilyen gerjesztett állapotot, amelyet ezzel a szerkezettel lehetett értelmezni.

Arra a kérdésre kell válaszolnunk, hogy milyen kapcsolatban van az alfa inelasztikus szórásban $E_x = 2,98$ MeV-nél talált kollektív $J^\pi = 3^-$ állapot az egyrészecskes héjmodellben értelmezett antianalóg állapotokkal? Méréseinkből az tűnik ki, hogy a $g_{9/2}$ IAR γ bomlásának végállapota ez a $J^\pi = 3^-$ állapot ($E_x = 2,982$ MeV-nél) és a közelében levő ($E_x = 3,002$ MeV) másik $J^\pi = 3^-$ nívó. (Lehetséges, hogy az inelasztikus szórás mérésénél a kísérleti felbontás nem volt elegendő szétválasztásukra és ezeket egybemérték.) Ha ez így van, akkor egy rendkívül érdekes jelenséggel állunk szemben. Az antianalóg állapot hullámfüggvényének szerkezete most két fő komponensből áll:

$$\bar{\psi}_{T_c} = a\psi_{T_c} + b\psi_{\text{kol}},$$



14. ábra. Antianalóg konfiguráció sematikus képe

ahol ψ_{T_c} a szokásos antianalóg konfiguráció (lásd a 14. ábrát) dominánsan egyrészecske jelleggel, míg a ψ_{kol} a törzs kollektív gerjesztéseit képviseli. „a” és „b” amplitúdók, $a^2 + b^2 = 1$ feltevéssel azt kell tehát mondanunk, hogy a kétféle kísérlet: az inelasztikus szórás és a (p, γ) reakció az állapot hullámfüggvényének más-más komponensére érzékeny. Ha inelasztikus szórásban gerjesztünk nívót, akkor ez a folyamat a kollektív komponensen keresztül történik, tehát az átmeneti valószínűség a ψ_{kol} együtthatóját méri, míg az analóg állapoton keresztül végbemenő (p, γ) reakció a hullámfüggvény egyrészecske típusú komponensének ψ_{T_c} -nek az amplitúdóját méri. Ugyanez történik a $(^3\text{He}, d)$ reakcióban is. Az általunk mért $\Gamma_\gamma(M1)$ átmeneti valószínűség azt mutatja, hogy ebben a kollektívnek ismert gerjesztésben milyen arányban van jelen az egyrészecske szerkezet.

Mindkét rezonancia spektrumában három fontos M1 átmenetet találunk az $E_x = 2,982$ MeV, $E_x = 3,002$ MeV és $E_x = 3,074$ MeV gerjesztett állapotokra vezető

elektromágneses átmeneteket. Ennek a hat γ átmenetnek az abszolút átmeneti erősségeit összegezve, a ^{64}Zn magban talált: $J^\pi = 3^-$; $g_{9/2}$ IAR-nek az izovektor M1 erősségére kapunk felvilágosítást. Ez az érték $\bar{I}_\gamma^{(\text{kis})}(\text{M1}) = 0,11 \text{ eV}$.

Elméleti becslést is tehetünk erre az alábbi összefüggés alapján (Hanna 1969):

$$I_\gamma^{(\text{elm})} = \frac{I_\gamma^W}{2T_0 + 1} S_n \beta^2 \quad (\text{eV}) \quad \text{II.1.}$$

A formulában I_γ^W a Weiskopf becsléssel számított átmeneti valószínűség eV-ban, $T_0 = a$ céltárgymag izospinje $\left(\frac{N-Z}{2}\right)$, $S_n = a$ szülő állapotra meghatározott spektroszkópiai faktor és β^2 a végállapotra vonatkozó betöltési valószínűség.

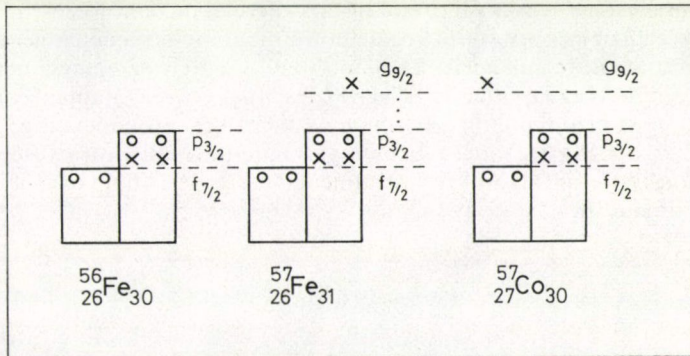
Ebből $I_{\gamma_{\text{M1}}}^{(\text{elm})} = 0,91 \text{ eV}$ -t kaptunk, ami a mért értéknek kb. hat-hétszerese. Ez azt jelenti, hogy a kezdő és végállapotok hullámfüggvényei nem adnak teljes átfedést, azaz nincsenek közeli rokonságban. Az antianalóg állapotban az egyszerű szerkezetű komponens amplitúdója lényegesen kisebb, mint a kollektív típusú gerjesztésé.

A $\frac{I_\gamma^{(\text{kis})}}{I_\gamma^{(\text{elm})}} = 0,12$ értéket az a^2 mértékének tekintve az $a^2 + b^2 = 1$ összefüggést érvényesnek feltételezve, a kollektív típusú gerjesztés amplitúdójára $b^2 = 0,88$ -at kapunk. Eredményünk az antianalóg állapot hullámfüggvényének szerkezetét úgy írja le, hogy kb. 12%-ban egyrészcseke gerjesztés, és 88%-ban kollektív típusú gerjesztés valósul meg.

B) A $^{56}\text{Fe} + p$ rendszer vizsgálata

A ^{57}Fe magban Sen Gupta és munkatársai (1971) találtak $g_{9/2}$ és $d_{5/2}$ neutron egyrészcseke állapotokat $E_x = 2,454$ és $2,506 \text{ MeV}$ gerjesztési energiáknál. $S_n = 0,27$ és $S_n = 0,11$ spektroszkópiai faktorok jellemzik a nivókat, amint az a $^{56}\text{Fe}(d, p)^{57}\text{Fe}$ reakció analiziséből adódott. Ezek a $g_{9/2}$ és $d_{5/2}$ IAR-ek szülő állapotaiként tekinthetők.

Célunk a $g_{9/2}$ IAR megtalálása volt. A céltárgy mag a ^{56}Fe páros-páros mag és zárt törzset alkot; $J^\pi = 0^+$ alapállapotú impulzuszmomentummal és paritással. A pro-



15. ábra. A ^{56}Fe mag alapállapotának és a ^{57}Fe és ^{57}Co magok $g_{9/2}$ típusú egyrészcseke gerjesztéseinek szerkezete a héjmodell szerint

tonok számára még két üres hely van az $f_{7/2}$ héjban, és a neutronok számára két üres hely van a $p_{3/2}$ pályán. A ^{56}Fe mag alapállapota és a ^{57}Fe magban található $g_{9/2}$ neutron egyrészecske állapot, valamint a ^{57}Co magban található $g_{9/2}$ proton állapot látható a 15. ábrán.

A Coulomb energia eltolódás becslése alapján a $g_{9/2}$ izobár analóg rezonanciát az ^{57}Co magban $E_x \sim 9,7$ MeV gerjesztési energiánál várjuk. Ez $E_p^{\text{lab}} \sim 3750$ keV bombázó proton energiát jelent.

$A\ ^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció

Gerjesztési függvények

A reakció ablakokban mért integrális típusú gerjesztési függvényét láthattuk már a 7. ábrán.

$E_p^{\text{lab}} = 3660\text{—}3850$ keV bombázó proton energia tartományban 2 keV-es lépésekben, 2 keV-es céltárggyal végeztük a méréseket. Az első ablak nagyon széles volt, $E_\gamma > 3$ MeV feletti összes γ átmenetet mérte. A második ablak az $5\text{ MeV} < E_\gamma < 7\text{ MeV}$ tartományt foglalta magában, ahol elvileg az antianalóg állapot pozíciója lenne, míg a harmadik ablak csak az $E_\gamma > 7$ MeV feletti γ átmenetek által kiváltott impulzusokat mérte, ami így gyakorlatilag az alapállapotot tápláló γ sugárzást tartalmazta. Valójában az analóg rezonancia helyét az egyik ablak sem jelzi egyértelműen, ahogyan azt már kifejtettük. A jelenség oka a ^{57}Co magban $E_x = 9,8$ MeV energiánál található nagy nivósűrűség. Itt látjuk nagy hasznát a differenciális gerjesztési függvény mérésének. A 9. ábrán látható a $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakcióra vonatkozó integrális és differenciális gerjesztési függvény összehasonlítva, abban a bombázó energiatartományban, ahol a keresett $g_{9/2}$ IAR megjelenik. A függvény mérése 2 keV-es lépésekben, 2 keV-es céltárgy alkalmazásával történt.

Érdekes megfigyelni, hogy az IAR megjelenését a ^{57}Co mag $J^\pi = 7/2^-$ spin és paritás értékű alapállapotára vezető γ átmenet igen szépen jelzi. $E_p = 3728$ és 3735 keV bombázó energiánál két erős rezonancia látszik. Azt, hogy ennek a két rezonanciának $J_R = 9/2$ spin érték felel meg, valószínűsítik a mellette feltüntetett átmenetek gerjesztési függvényei. Azokon az energiákon, ahol ezek a rezonanciák helyezkednek el, az alacsony spinű végállapotokra vezető átmenetek gerjesztési függvényei nem mutatnak rezonanciát. Látható, hogy ez a két rezonancia nem populálja az alacsony spinű végállapotokat. A gerjesztési függvények alapján ennyit állapíthatunk meg. Most bizonyítanunk kell, hogy a talált két rezonancia a $g_{9/2}$ IAR komponense. Az $E_x = 4,585$ MeV-nél található gerjesztett alapállapotra vezető γ átmenet gerjesztési függvénye az alapra vezető átmenet gerjesztési függvényéhez hasonlóan jelzi a két rezonanciát.

Szögeloszlás mérések

A gamma sugaraknak a bejövő protonnyaláb irányára vonatkozó szögeloszlását az alábbi elméleti (lásd *Sharp—Kennedy* 1954) formula adja meg:

$$W(\Theta) = \sum_k (-)^{i_p + j_p + j_{p'} + I_1 - I_2 + I_1 - I_1'} (2j+1)^{1/2} (2j'+1)^{1/2} Z(l_1 j_p l_1' j_{p'}; i_p k) \times \\ \times W(j_p j_{p'} j; I_1 k) [Z_1(L j L j; I_2 k) + 2\delta Z_1(L j L' j; I_2 k) + \\ + \delta^2 Z_1(L j L j; I_2 k)] P_k(\cos \Theta), \quad \text{II.2}$$

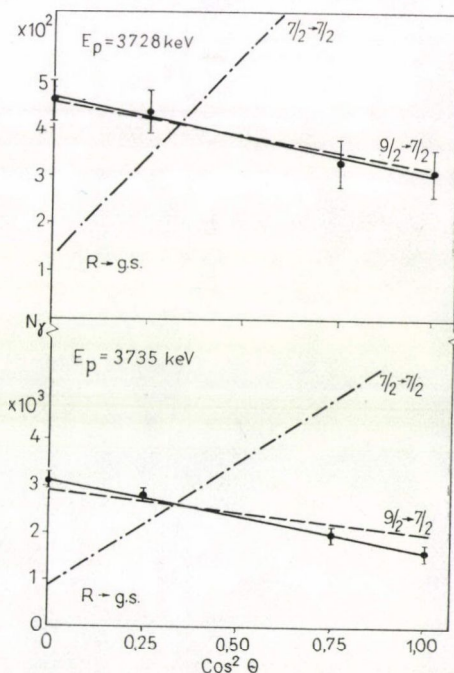
ahol i_p és l_1 a bejövő részecske spin és pályamomentuma, $j_p = i_p + l_1$ a rezonancia spinje, I_1 a céltárgy spinje, I_2 a γ bomlás végállapotának spinje, L és L' a lehetséges multipólusok, δ a keverési paraméter. $\delta = \left| \frac{M2}{E1} \right|$ például, ha $(E1 + M2)$ keveredés van.

Ha egy γ átmenetre i darab szögben meghatározzuk a kísérleti szögeloszlás függvényt, akkor a két függvénynek az illesztéséből megkapjuk azokat a paraméter értékeket, amelyek az átmenetet jellemzik, azaz pl. a rezonancia spinjét. Ez úgy történik, hogy a

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_i \Delta W_i |W^{\text{kis}}(\Theta_i) - W^{\text{elm}}(\Theta_i)|^2 \quad \text{II.3}$$

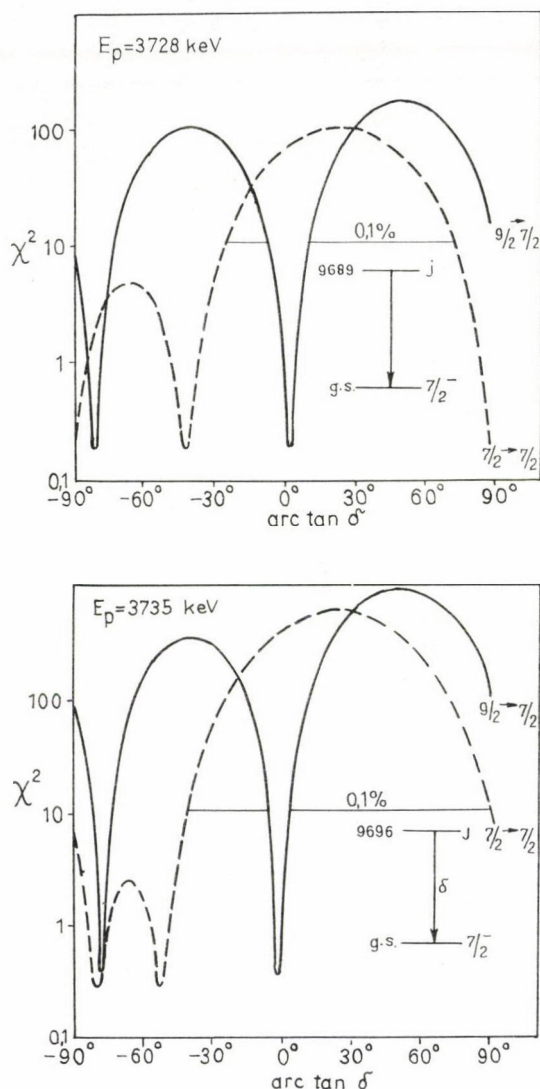
kifejezést minimalizáljuk. N = a szabadsági fokok száma (amely attól függ, hány szögben mértünk, és függvényünkben mennyi az ismeretlen paraméterek száma), ΔW_i a statisztikus súlyfaktor, W^{kis} az i -edik szögben meghatározott kísérleti érték, W^{elm} az elméletileg számított függvény a Θ_i szögben.

A 16. ábra az alapállapotú gamma átmenet mért és számított szögeloszlását mutatja az $E_p = 3728$ és az $E_p = 3735$ keV-es rezonancián. A rezonancia spinre $J_R = 9/2$ -et tételezve fel, az eloszlás egészen közel van a kísérleti eloszláshoz, míg a $J_R = 7/2$ feltételezéssel kapott elméleti érték nagyon messze fekszik a kísérletileg meghatározott eloszlástól és csak igen nagy δ keverési paraméter értékkel lehetne az elméleti eloszlást ezekhez a kísérleti pontokhoz illeszteni. Ezt mutatják a 17. ábrán látható χ^2 eloszlások is. Fizikai érv sem támasztja alá a nagy δ értéket, mert az intenzív γ átmenet meglehetősen tiszta E1 dipol sugárzásra jellemző, és nem látunk



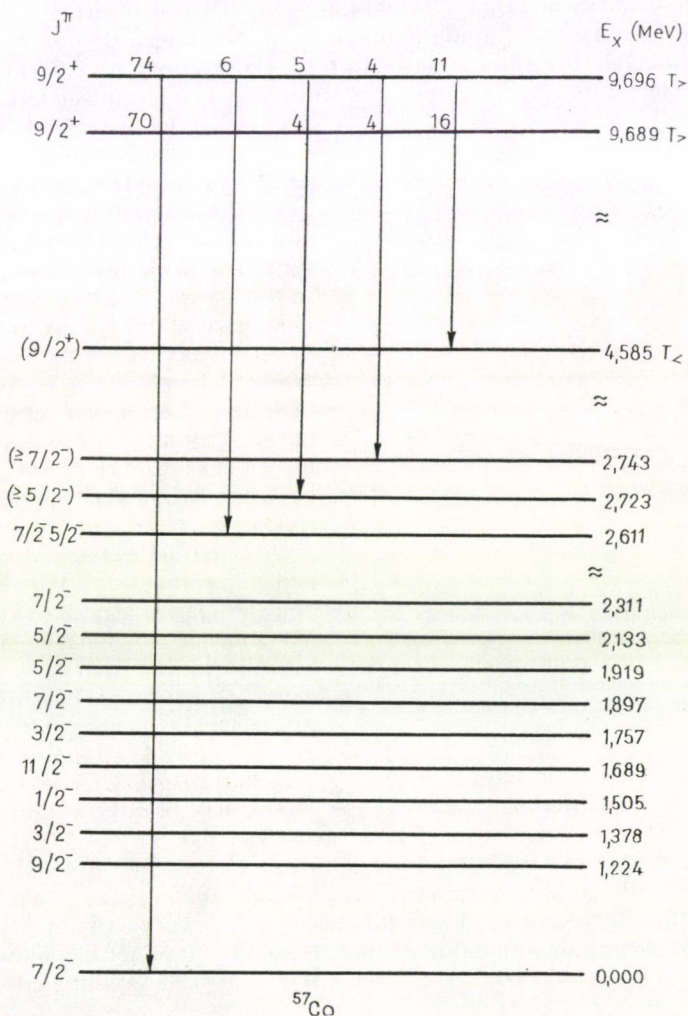
16. ábra. Az alapállapotra vezető gamma átmenet szögeloszlása a $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakcióban az $E_p = 3728$ és 3735 keV-es rezonancián. A kísérleti pontok és az elméletileg számított eloszlások $J_R = 9/2$ (szaggatott vonal) és $J_R = 7/2$ (pont-vonás) spint feltételezve

magyarázatot arra, hogy miért jelenne meg mellette nagyobb valószínűséggel M2 átmenet. Következésképpen mindkét rezonanciára elfogadtuk a $J_R=9/2$ spin értéket. Hátra van még annak a belátása, hogy azok pozitív paritásúak. A szögeloszlás függvények a paritás megkülönböztetésére nem alkalmasak. Csupán elméleti megfontolásokra szorítkozva állítjuk, hogy ebben a gerjesztési energiatartományban $9/2$ spinű állapot



17. ábra. A χ^2 eloszlás, mint a δ keverési paraméter függvénye az $E_p = 3728$ és 3735 keV -es rezonanciára vonatkozóan a $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakció alapállapotra vezető gamma sugárzásnak szögeloszlása esetében

pozitív paritással a $g_{9/2}$ héjmodell pályán elhelyezkedő részecskét jelent, de negatív paritással és $9/2$ spinnel egyrészecske állapot nem eshet ide. A két rezonancia viszont egyszerű szerkezetű, egyrészecske gerjesztés, amit az is bizonyít, hogy gamma bomlásukban a ^{57}Co mag alapállapotának kitüntetett szerepe van. A ^{57}Co mag alapállapota zárt törzsből és a rajta kívül elhelyezkedő egy nukleonból áll, ami az $f_{7/2}$ héjban található. Kiválasztási szabályunk valóban kiválasztási szabályként viselkedik, és a lehetséges végállapotok közül kiválasztja a legegyszerűbbet az IAR γ bomlása számára, amely szintén egyszerű szerkezetű. Jelen esetben ez az alapállapot.

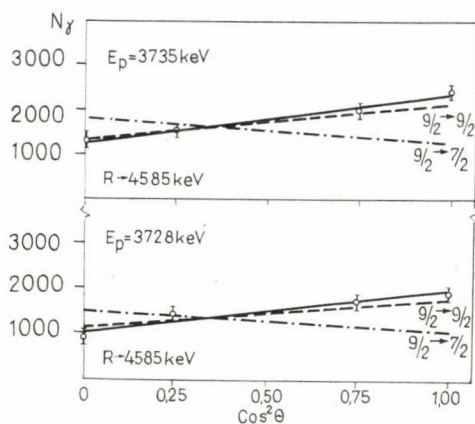


18. ábra. A ^{57}Co mag nivósémája, a $g_{9/2}$ IAR két komponensének gamma bomlására vonatkozó elágazási arányaival

A $g_{9/2}$ antianalóg állapot

Bár a $g_{9/2}$ IAR-nek mindkét komponense gamma bomlása során az alapállapotot tünteti ki, tehát a spektrumban dominál a $9/2^+ \rightarrow 7/2^-$ E1 átmenet, ugyanakkor megtalálható — bár jóval gyengébben — az antianalóg állapotra vezető izovektor M1 γ átmenet is. Az $E_p = 3728$ és $E_p = 3735$ keV-nél megjelenő rezonanciák γ bomlását és elágazási arányait mutatja a 18. ábra. A két rezonancia viszonylag nagy, 16 és 11 %-os elágazási aránnyal bomlik az $E_x = 4,585$ MeV gerjesztett állapotra, amely a $g_{9/2}$ antianalóg állapotnak felel meg. (Érdemes megjegyezni, hogy méréseink publikálása után jelent meg az a ($^3\text{He}, d$) reakcióról beszámoló cikk, amely ennek az állapotnak a megtalálásáról szintén beszámol; $E_x = 4,593$ MeV-nél $I_p = 4$ gerjesztett nivó jelenlétét mutatja ki (Hamida Banu és H. M. Sen Gupta 1978).

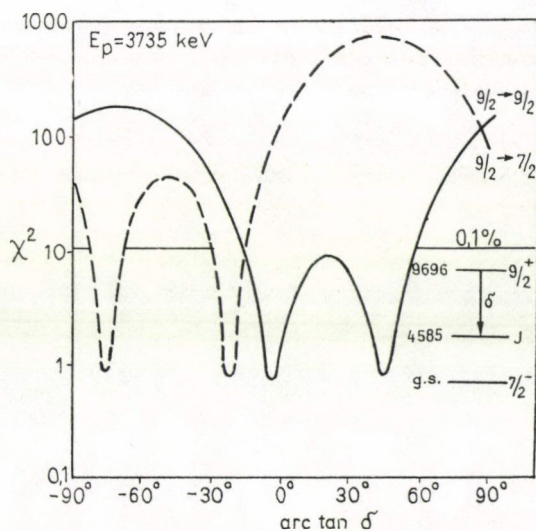
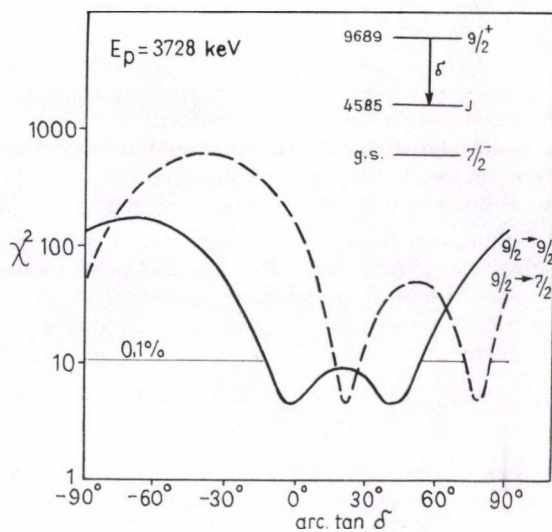
A rezonanciákból az antianalóg állapotra vezető gamma átmenetekre vonatkozó szögeloszlás méréseink erre az újonnan talált nivóra is valószínűsítették a $J^\pi = 9/2^+$ spin és paritás hozzárendelést.



19. ábra. A $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakcióban a $g_{9/2}$ analóg rezonancia két komponenséről az $E_x = 4,585$ MeV gerjesztett állapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása. A kísérletileg mért pontok és a végállapotra $9/2$ spint (szaggatott vonal) és $7/2$ spint (pont-vonal görbe) feltételezett elméleti eloszlások

A 19. ábrán láthatjuk az IAR-ból az $E_x = 4,585$ MeV gerjesztési energiánál talált antianalóg állapotra vezető γ sugárzás szögeloszlását. A mért eloszlást reprezentáló pontok az elméletileg számított szögeloszlás függvényekkel vannak összehasonlítva. A rezonanciákra az elfogadott $J_R = 9/2^+$ spin és paritás értéket feltételezve, a végállapotra $J = 9/2$ és $7/2$ értékeket vettük számításba. A 20. ábrán a χ^2 eloszlásokat mutatjuk be ugyanezekre az átmenetekre a δ keverési paraméter függvényében. A legkisebb χ^2 érték itt is a végállapotra $J = 9/2$ spin feltevéssel adódik. Ez fizikailag megint azzal támasztható alá, hogy a sugárzás egy izovektor ($\Delta T = 1$) M1 átmenet, amelyhez nem várunk E2 hozzákeveredést már csak azért sem, mert az izovektor E2 átmenetek az izoskalár M1 átmenetekhez hasonlóan izospin tiltottak (Warburton 1969).

Mindezek alapján állíthatjuk, hogy a $g_{9/2}$ izobár analóg állapotot két komponensre felhasadva találtuk meg; $E_p^{\text{lab}} = 3728$ és 3735 keV bombázó proton energiáknál. A két rezonancia pozíciója megfelel a várt pozíciónak ($E_p^{\text{lab}} = 3755$ keV), amely az E1 Kateb és Griffiths (1975) által meghatározott Coulomb eltolódási energiából következik. A differenciális gerjesztési függvények szintén a $g_{9/2}$ IAR jelenlétére utalnak. A két rezonancián mért szögeloszlás szintén alátámasztja a $J_R = 9/2$ spin hozzárendelést. Végül az antianalóg állapotra vezető γ átmenet bizonyítja (a tőlünk független ($^3\text{He}, d$) mérést is beleértve, hogy valóban a $g_{9/2}$ IAR-antianalóg rendszert találtuk meg.



20. ábra. A $^{56}\text{Fe}(p, \gamma)^{57}\text{Co}$ magreakcióban a $g_{9/2}$ IAR komponensekről az $E_x = 4,585 \text{ MeV}$ állapotra vezető γ átmenetek szögeloszlására vonatkozó χ^2 eloszlások, mint a δ keverési paraméter függvényei

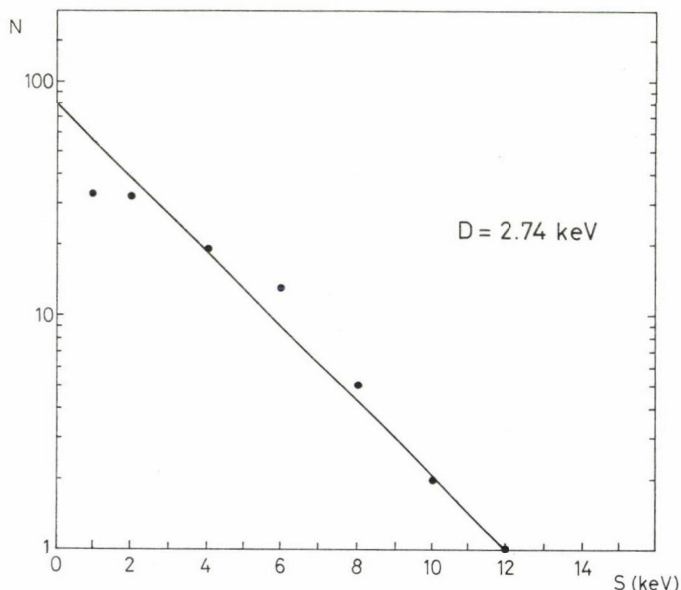
Nívósűrűség a ^{57}Co magban

Ha a $(^{54}\text{Fe}_{28}+p)$, a $(^{56}\text{Fe}_{30}+p)$ és a $(^{58}\text{Fe}_{32}+p)$ rendszert megvizsgáljuk, látjuk, hogy a nívósűrűség értékek nagyságrendeket változnak (lásd *Lindström* 1971). A neutronban zárt $N=28$ törzstől haladva a magasabb neutron számok felé a nívósűrűség értékek rohamosan nőnek, ha azonos gerjesztési energiákon hasonlítjuk össze. Természetesen, ha egyre magasabb gerjesztési energiákon vizsgáljuk a nívósűrűség értékeket egy adott izotóp esetén, a nívósűrűség szintén gyorsan növekszik.

A $g_{9/2}$ IAR a ^{57}Co magban $E_x \sim 9,7$ MeV gerjesztési energián található meg. Itt már a nívósűrűség olyan nagy, hogy az IAR megtalálása nem egyszerű feladat, ahogyan azt az ablakban mért integrális gerjesztési függvények (7. ábra) mutatják. Ezt az integrális típusú gerjesztési függvényt megmértük egy szélesebb $E_p^{\text{lab}} = 3700\text{--}3900$ keV bombázó proton energia tartományban is. A gerjesztési függvényben talált összes rezonanciák számából az

$$N = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{S}{D}\right) \quad \text{II.4}$$

összefüggés segítségével (Dubois 1961, Demeter et al 1968) kiszámítottuk az átlagos nívótávolságot (D). N jelenti a rezonanciák (gerjesztett állapotok) számát, amelyek



21. ábra. Az átlagos nívótávolság meghatározása az $N = N_0 \cdot \exp\left(-\frac{S}{D}\right)$ összefüggés alapján a ^{57}Co magban. A pontok az általunk a gamma csatornában mért gerjesztési függvényből származnak. Az egyenes meredeksége D (az átlagos nívótávolság)

egymástól S (keV)-nél nagyobb távolságra vannak. A 21. ábrán látható az a mérési pontokból származtatott egyenes, amelynek a meredeksége $D=2,7\pm 0,3$ keV. Tehát a ^{57}Co magban $E_x\sim 9,7$ MeV gerjesztési energián az átlagos nívótávolság (spinekre való tekintet nélkül) $D\sim 3$ keV.

Az abszolút γ átmeneti valószínűségek

A $g_{9/2}$ izobár analóg rezonanciákon mért γ spektrumokból meghatározott erősségek $\frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{\Gamma_{\text{tot}}}$ és abszolút átmeneti valószínűségek Γ_γ (eV) találhatóak a III. táblázatban.

III. TÁBLÁZAT

A $g_{9/2}$ analóg rezonancia komponensekből a ^{57}Co mag különböző gerjesztett állapotaira vezető γ sugárzások erősségei és az abszolút átmeneti valószínűségek eV-ban és Weisskopf egységekben

^{57}Co E_x (MeV)	J^π	$E_p=3728$ keV			$E_p=3735$ keV		
		$\omega \frac{\Gamma_p \cdot \Gamma_\gamma}{\Gamma_t}$ (keV)	Γ_γ (eV)	$\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_{\text{W.u.}}}$	$\omega \frac{\Gamma_p \cdot \Gamma_\gamma}{\Gamma_t}$ (keV)	Γ_γ (eV)	$\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma_{\text{W.u.}}}$
0,000	7/2 ⁻	$12,0 \cdot 10^{-4}$	0,24	$3,0 \cdot 10^{-4}$	$11,0 \cdot 10^{-4}$	0,23	$3,0 \cdot 10^{-4}$
2,611	7/2 ⁻ , 5/2 ⁻	$1,0 \cdot 10^{-4}$	0,02		$0,8 \cdot 10^{-4}$	0,02	
2,723	5/2 ⁻	$0,7 \cdot 10^{-4}$	0,01		$0,8 \cdot 10^{-4}$	0,02	
2,743	7/2 ⁻	$0,7 \cdot 10^{-4}$	0,01		$0,7 \cdot 10^{-4}$	0,01	
4,585	9/2 ⁺	$3,0 \cdot 10^{-4}$	0,05	$1,8 \cdot 10^{-2}$	$2,0 \cdot 10^{-4}$	0,03	$1,2 \cdot 10^{-2}$

A $g_{9/2}$ IAR két megtalált komponensének az alapállapot $E1$ átmenetére, így $3,10^{-4}$ Weisskopf egységnyi erősséget kaptunk, ami a két komponensre összegezve is csak $6,10^{-4}$ W.u. Az előző fejezetben ismertetett módon elméleti becslést tehetünk. Ebből $\Gamma_{\gamma 0}^{\text{elm}}(E1)\sim 8$ eV adódik, míg a mérésekből a két rezonancia $\Gamma_{\gamma 0}$ értékeinek összege $\bar{\Gamma}_{\gamma 0}(E1)\cong 0,47$ eV.

Az elméletileg becsült és a mérésekből számított értékek közötti nagy eltérés magyarázata az lehet, hogy az analóg rezonancia γ bomlásában nemcsak az az alapállapot γ átmenet játszik szerepet, de az $E_x=4,585$ MeV gerjesztési energiánál fekvő antianalóg állapot is. Az antianalóg állapotra vezető $M1$ átmenetre kapott abszolút átmeneti valószínűség értékek ugyancsak a III. táblázatban vannak feltüntetve. A két rezonancia komponensre vonatkozóan $1,8\cdot 10^{-2}$, illetve $1,2\cdot 10^{-2}$ Weisskopf egységnyi erősséget találtunk, amelyek összegezve $3\cdot 10^{-2}$ Weisskopf egység erősséget tesznek ki. Ez az érték nem meglepően kicsiny, mert az $f_{7/2}-p_{3/2}$ héjban talált legtöbb analóg \rightarrow antianalóg $M1$ átmenet ebbe a nagyságrendbe esik, amikor az analóg vagy az antianalóg állapot nem egy nívóra koncentrálna jelenik meg, hanem komponensekre felhasadva. Érdekes elvégezni a fenti elméleti becslést a II.1. formula alapján ebben az esetben is. Erre az átmenetre $\Gamma_{\gamma}^{\text{elm}}(M1)=0,05$ eV adódik. Ezt összevetjük a kísérletekből kapott 0,05 eV és 0,03 eV értékekkel, amelyek összegezve $\bar{\Gamma}_{\gamma}^{\text{kis}}(M1)=0,08$ eV-ot adnak. Ez az érték a becslést még felül is múlja. Természetesen tudnunk kell, hogy az S_n és β^2 mennyiségek hibái 20–25% körül vannak.

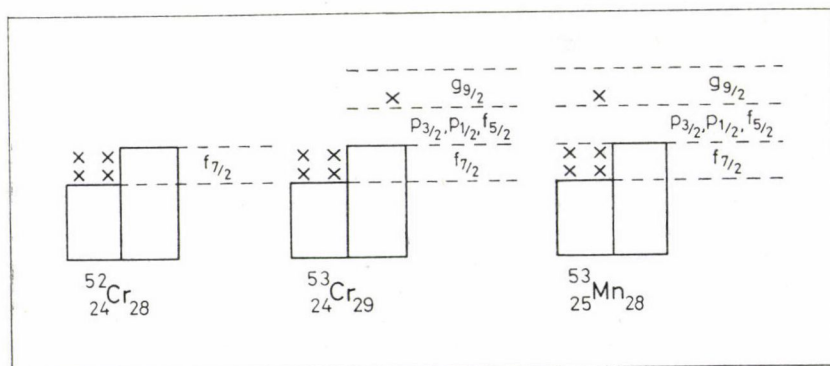
Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az izobár analóg rezonancia szerkezetével a legnagyobb rokonságot az $E_x=4,585$ MeV-nél található $g_{9/2}$ antianalóg állapot szerkezete mutatja. Erre a nívóra vezető $M1$ γ átmenet erőssége a spektroszkópiai faktorokkal számított elméleti becslést jól megközelíti. Ebből következik, hogy a $g_{9/2}$ IAR és $g_{9/2}$ antianalóg állapotok hullámfüggvényeinek szerkezetei valóban alá-támasztják azt a leegyszerűsített elképzelést, amelyet leírásukra használunk.

Az alapállapotra vezető $E1$ gamma átmenet — bár a spektrumokban dominál — abszolút átmeneti erőssége távol van az elméleti becsléstől. Ez a tény azt mutatja, hogy egyszerű szerkezetű végállapottal van dolgunk, de az analóg állapottal való rokonsága mégsem olyan nagyfokú, mint az antianalóg állapoté.

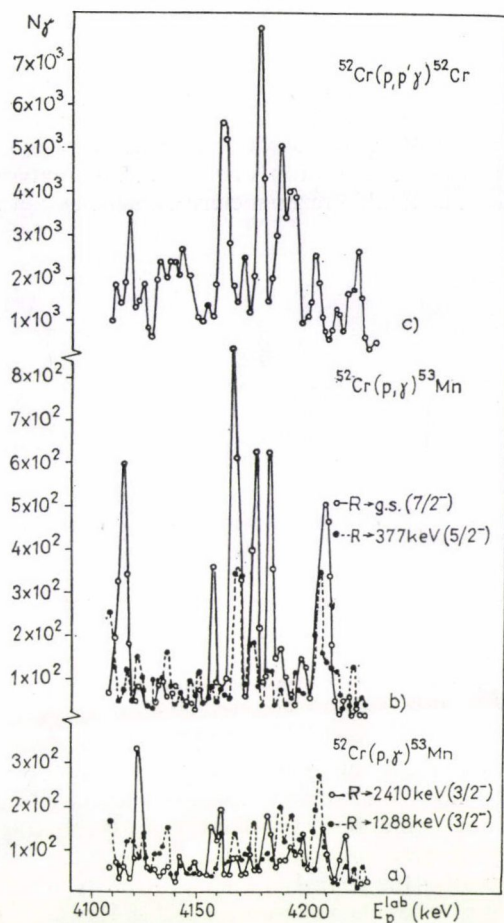
C) $A^{52}\text{Cr}+p$ rendszer vizsgálata

A $^{52}_{24}\text{Cr}_{28}$ atommagot alapállapotában — a héjmodell szerint — egy neutronokra vonatkozóan zárt törzs $N=28$ (az $f_{7/2}$ héj tele van) és $Z=24$ proton alkotja. Az alapállapot impulzusmomentuma és paritása $J^\pi=0^+$ mint a páros-páros magoknak általában (22. ábra).

A $^{52}\text{Cr}(d,p)^{53}\text{Cr}$ magreakció az $E_x=3,715$ MeV gerjesztési energiánál olyan nívót jelez a ^{53}Cr magban, amelyre vonatkozóan a befogott neutron pályamomentuma $l_n=4$ és a spektroszkópiai faktor $S_n=0,57$ (Kocher 1972). A gerjesztett állapot spinje és paritása nagy valószínűséggel $J^\pi=9/2^+$. Ez a neutron állapot tekinthető a ^{53}Mn magban kialakuló $g_{9/2}$ izobár analóg rezonancia szülő állapotának. A 22. ábrán láthatjuk a ^{53}Cr magban található $g_{9/2}$ proton gerjesztések szerkezetét. Ha a $g_{9/2}$ héjban elhelyezkedő neutronot protonra cseréljük ki, a Coulomb energia eltolódás figyelembevételével a $g_{9/2}$ analóg állapot megjelenése a ^{53}Mn magban $E_x=10,6$ MeV gerjesztési energiánál várható. Galès és társai ezt az állapotot valóban megtalálták két komponensre felhasadva az általuk megmért $^{52}\text{Cr}(^3\text{He}, d)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban (Galès 1976).



22. ábra. A ^{52}Cr mag alapállapotának szerkezete a héjmodell szerint, és a $g_{9/2}$ egyrészecske gerjesztések szerkezete a ^{53}Cr és ^{53}Mn magokban



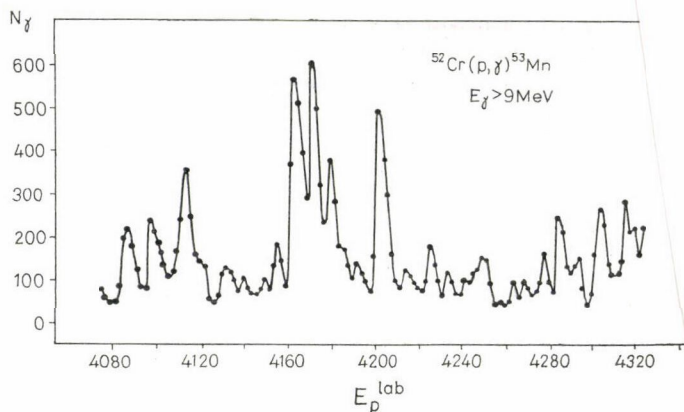
24. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióból származó négy különböző végállapotra vezető γ sugárzás gerjesztési függvényei (24a és 24b ábrákon) és a $^{52}\text{Cr}(p, p' \gamma)^{52}\text{Cr}$ reakció gerjesztési függvénye (24c ábra) a $g_{9/2}$ IAR környezetében

és 4182 keV bombázó proton energiáknál található rezonanciákra vonatkozóan, a megfelelő χ^2 eloszlásokkal együtt. Ahol a mért szögeloszlások nem írhatók le lineáris függvénnyel, hanem másodfokú tag is szükséges, a χ^2 eloszlások aszimmetrikusak. A valódi megoldást a $\delta \sim 0$ -nak megfelelő minimum adja, mert az jelenti a majdnem teljesen tiszta $E1$ átmenet megvalósulását.

A kísérletileg meghatározott szögeloszlás függvények tehát a rezonanciákra feltetelezett $J_R = 9/2$ spint igazolják. Az előző fejezetben ismertetett gondolatmenet szerint ismét a pozitív paritást fogadjuk el, mint lehetségeset a rezonanciák hullám-függvényére vonatkozóan, a héjmodell pályák elhelyezkedése alapján.

$A^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakció

Célkitűzésünk a $g_{9/2}$ IAR megtalálása volt a γ csatornában. ablakokban mért gerjesztési függvények tanulmányozásával kezdve. A 23. ábrán az $E_\gamma > 9 \text{ MeV}$ alsó küszöb értékkel mért függvény $E_p^{\text{lab}} = 4080\text{—}4320 \text{ keV}$ bombázó proton energia tartományban. egyértelmű felvilágosítást az analóg rezonanciáról, amelynek két ke-



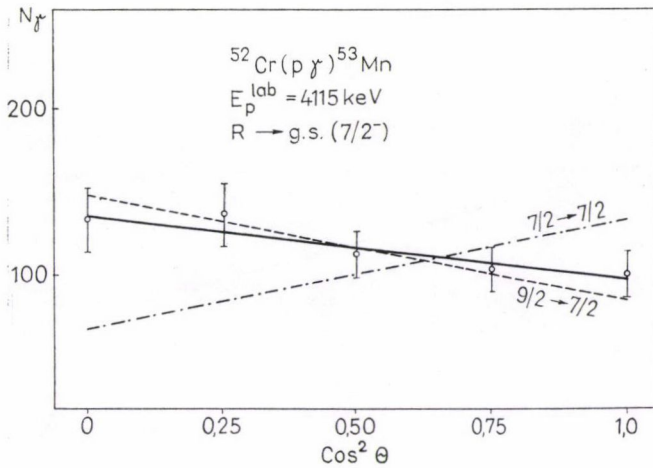
23. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakció integrális típusú gerjesztési függvénye $E_p = 4080\text{—}4320 \text{ keV}$ bombázó proton energia tartományban

tük a $(^3\text{He}, d)$ mérés alapján. A differenciális gerjesztési görbét — 2 keV céltárgyat használva — 2 keV -es bombázó proton energia lépésekben mértük. A 24a és 24b ábrákon négy különböző végállapotra vezető γ átmenet gerjesztési függvényét láthatjuk. A gerjesztési függvények gondos analízise azt mutatja, hogy az $E_p^{\text{lab}} = 4115 \text{ keV}$, 4157 keV , 4165 keV , 4176 keV és 4182 keV bombázó proton energiáknál található 5 erős rezonancia, valamint az $E_p^{\text{lab}} = 4134 \text{ keV}$, 4140 keV , 4143 keV és 4197 keV bombázó energiáknál megjelenő 4 gyenge rezonancia valamely $g_{9/2}$ IAR felhasadt komponenseinek tekinthetők. Ez a sok komponens nem rejtőz el, ha tekintetbe vesszük a magas gerjesztési energiát ott, ahol ezek a rezonanciák hatnak, és az itt várható nagy nívósűrűséget a ^{53}Mn magban. A részecske titerreakciók rosszabb felbontása magyarázza azt, hogy ezeket a komponenseket a $(^3\text{He}, d)$ reakcióban egybeemérték.

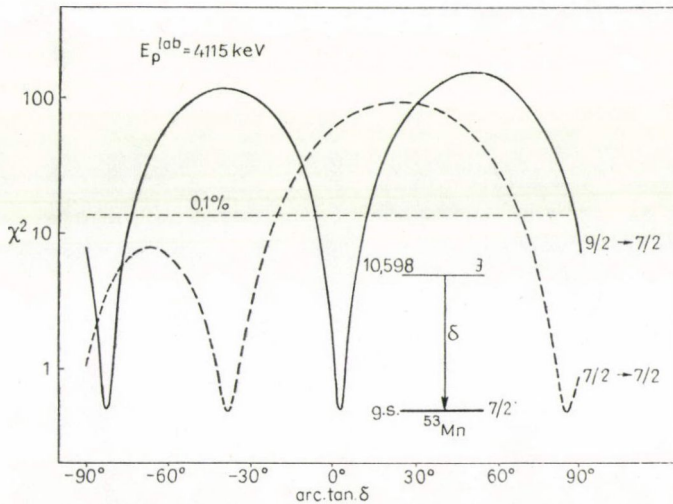
Szögeloszlás vizsgálatok

Miután a talált rezonanciák pozíciója megfelel az izobár analóg rezonancia ható helyének, további bizonyításul az öt erősebb komponensen γ szögeloszlás méréseket végeztünk, hogy a rezonanciák spin értékét meghatározzuk.

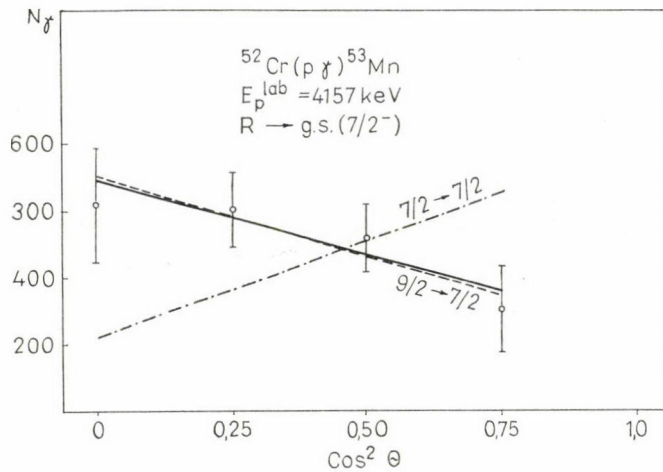
Az alapállapotra vezető γ átmenetre vonatkozó szögeloszlások (mérési pontok hibáikkal) és a $J_R = 9/2$, ill. $J_R = 7/2$ spin feltevéssel számított szögeloszlás függvények láthatók a 25.—29. ábrákon az $E_p = 4115 \text{ keV}$, 4157 keV , 4165 keV , 4176 keV



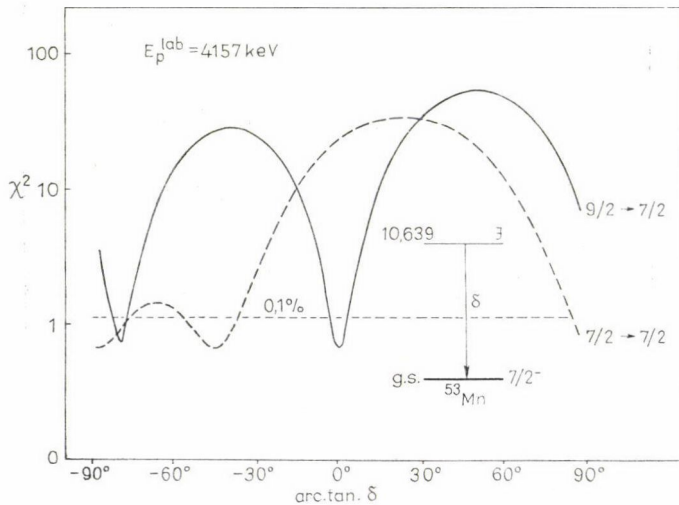
25a ábra. Az alapállapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban, az $E_p = 4115 \text{ keV}$ bombázó energiánál talált rezonancián. Mérési pontok a hibákkal, az elméleti eloszlásfüggvény $J_R = 9/2$ (szaggatottvonal) és $J_R = 7/2$ (pontosvonal) spint feltételezve



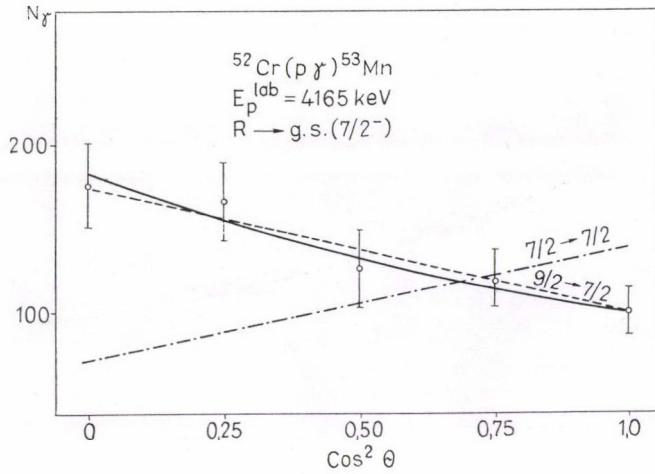
25b ábra. χ^2 eloszlásfüggvény a δ keverési paraméter függvényében az $E_p = 4115 \text{ keV}$ rezonanciából származó és az alapállapotra vezető γ sugárzás esetében; $J_R = 9/2$ (folytonos görbe) és $J_R = 7/2$ (szaggatott) spint feltételezve



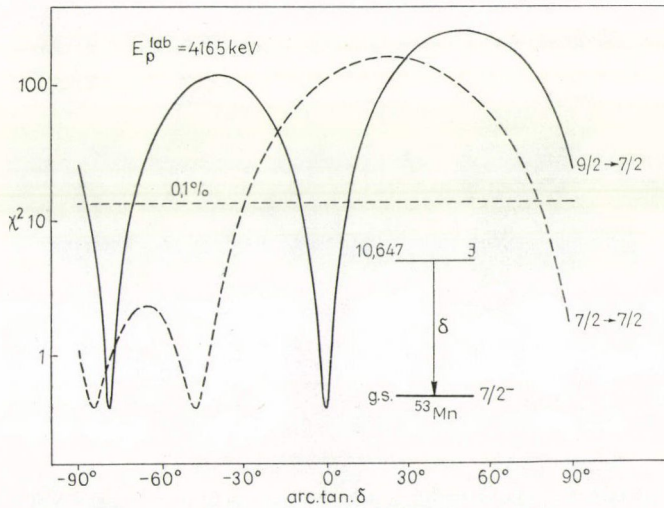
26a ábra. Az alapállapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban az $E_p = 4157 \text{ keV}$ bombázó energiánál talált rezonancián. A mérési pontokat és az elméleti eloszlásfüggvényt láthatjuk $J_R = 9/2$ (szaggatott vonal) és $J_R = 7/2$ (pontos vonás) spint feltételezve



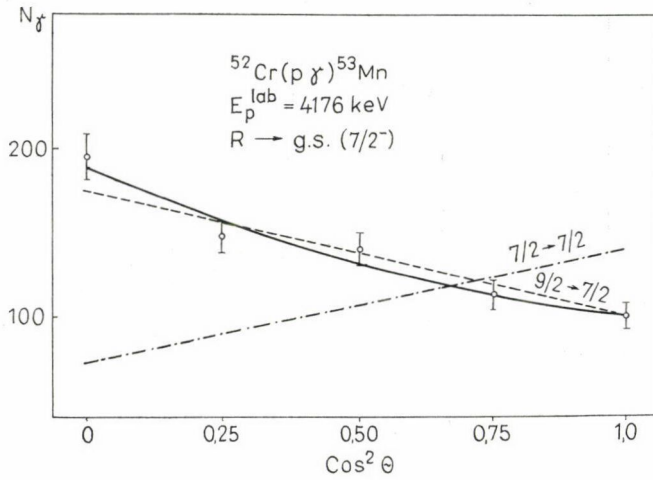
26b ábra. χ^2 eloszlásfüggvény a δ keverési paraméter függvényében az $E_p = 4157 \text{ keV}$ rezonanciából származó és az alapállapotra vezető γ sugárzás esetében; $J_R = 9/2$ (folyamatos görbe) és $J_R = 7/2$ (szaggatott) spint feltételezve



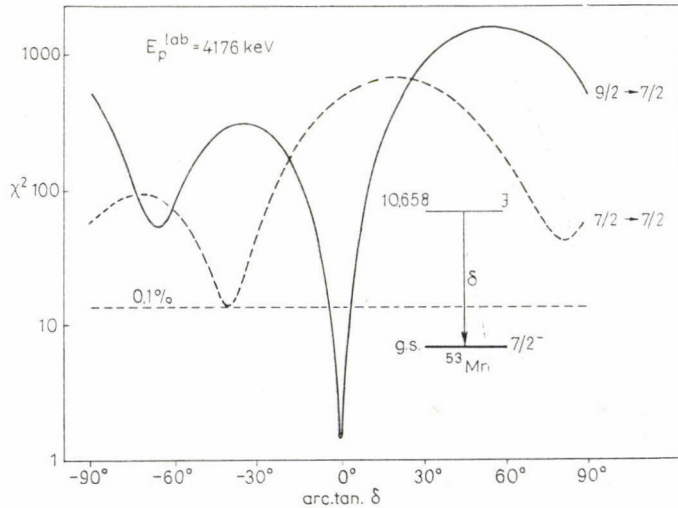
27a ábra. Az alapállapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban az $E_p = 4165$ keV bombázó energiánál talált rezonancián. A mérési pontokat és az elméleti eloszlásfüggvényt láthatjuk $J_R = 9/2$ (szaggatott vonal) és a $J_R = 7/2$ (pontos vonal) spint feltételezve



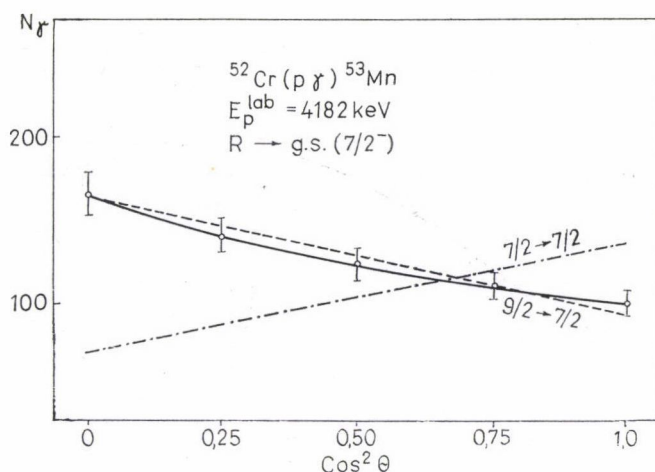
27b ábra. χ^2 eloszlásfüggvény a δ keverési paraméter függvényében az $E_p = 4165$ keV rezonanciából származó és az alapállapotra vezető γ sugárzás esetében; $J_R = 9/2$ (folyamatos görbe) és $J_R = 7/2$ (szaggatott) spint feltételezve



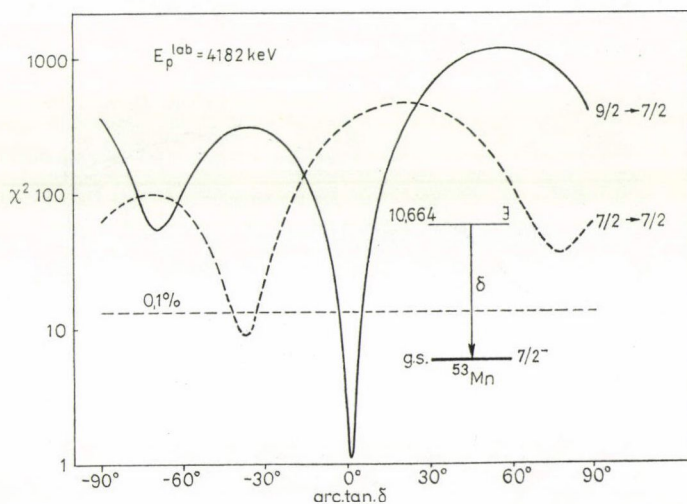
28a ábra. Az alapállapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban az $E_p = 4176 \text{ keV}$ bombázó energiánál talált rezonancián. A mérési pontokat és az elméleti eloszlásfüggvényt láthatjuk $J_R = 9/2$ (szaggatott vonal) és $J_R = 7/2$ (pontvonal) spint feltételezve



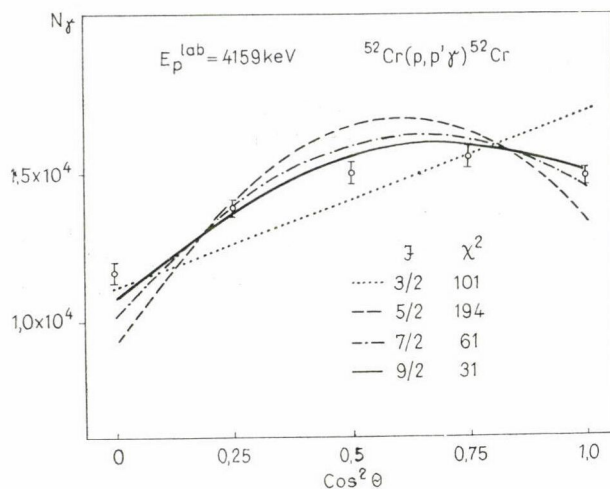
28b ábra. χ^2 eloszlásfüggvény a δ keverési paraméter függvényében az $E_p = 4176 \text{ keV}$ rezonanciából származó és az alapállapotra vezető γ sugárzás esetében; $J_R = 9/2$ (folyamatos görbe) és $J_R = 7/2$ (szaggatott) spint feltételezve



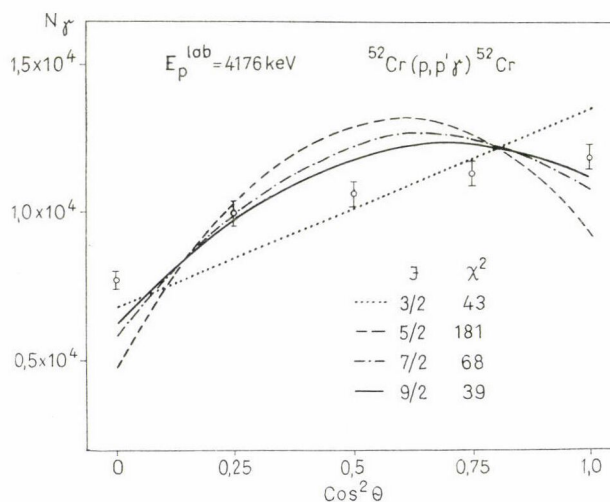
29a ábra. Az alapállapotra vezető γ sugárzás szögeloszlása az $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban az $E_p = 4182 \text{ keV}$ bombázó energiánál talált rezonancián. A mérési pontokat és az elméleti eloszlás függvényt láthatjuk $J_R = 9/2$ (szaggatott vonal) és $J_R = 7/2$ (pont-vonal) spint feltételezve



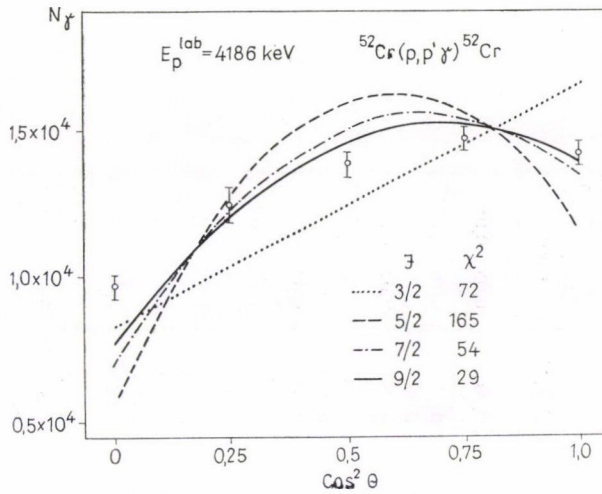
29b ábra. χ^2 eloszlásfüggvény a δ keverési paraméter függvényében az $E_p = 4182 \text{ keV}$ rezonanciából származó és az alapállapotra vezető γ sugárzás esetében; $J_R = 9/2$ (folytonos görbe) és $J_R = 7/2$ (szaggatott) spint feltételezve



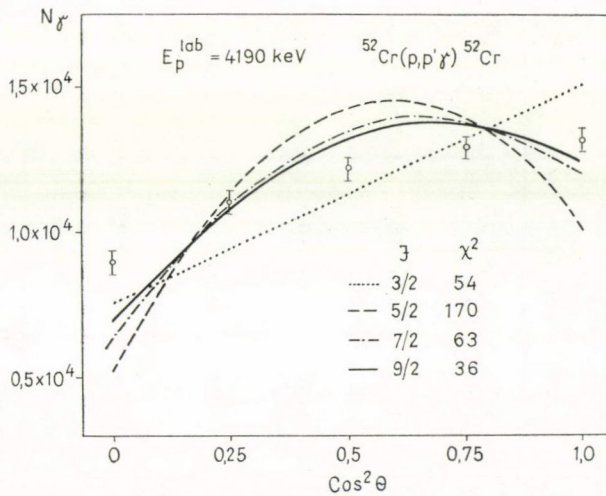
30. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, p' \gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióból származó γ sugárzás szögeloszlása $E_p = 4159$ keV bombázó energián. Az ábrán a mért értékek és a különböző spin feltételezéssel számított elméleti függvények a hozzájuk tartozó χ^2 értékkel együtt láthatók



31. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, p' \gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióból származó γ sugárzás szögeloszlása $E_p = 4176$ keV bombázó energián. Az ábrán a mért értékek és a különböző spin feltételezéssel számított elméleti függvények a hozzájuk tartozó χ^2 értékkel együtt láthatók



32. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, p')^{52}\text{Cr}$ reakcióból származó γ sugárzás szögeloszlása $E_p = 4190 \text{ keV}$ bombázó energián. Az ábrán mért értékek és a különböző spin feltételezéssel számított elméleti függvények a hozzájuk tartozó χ^2 értékkel együtt láthatók



33. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, p')^{52}\text{Cr}$ reakcióból származó γ sugárzás szögeloszlása $E_p = 4190 \text{ keV}$ bombázó energián. Az ábrán mért értékek és a különböző spin feltételezéssel számított elméleti függvények a hozzájuk tartozó χ^2 értékkel együtt láthatók

IV. TÁBLÁZAT

$^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban talált $g_{9/2}$ IAR komponensekből származó γ átmenetek szögeloszlásának méréséből kapott eredmények összefoglalása

E_p (keV)	E_x (MeV)	Átmenet $E_i^{\text{MeV}} \rightarrow E_f^{\text{MeV}}$	Legendre polinomok együtthatói A_2/A_0 A_4/A_0	A feltételezett átmenet és multipol rendje	δ Weisskopf becslés	δ Kisérl.	Elfogadott spin és paritás
4115	10,595	10,595 \rightarrow 0,0	$-0,22 \pm 0,13$ $0,02 \pm 0,13$	9/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2) 9/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2)	0,005 ¹ 0,228 0,228 0,005	$0,05 \pm 0,05$ $0,78 \pm 0,05$	9/2 ⁺
4157	10,639	10,639 \rightarrow 0,0	$-0,38 \pm 0,17$ $0,01 \pm 0,25$	9/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2) 9/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2)	0,005 0,229 0,229 0,005	$0,02 \pm 0,05$ $1,00 \pm 0,05$	9/2 ⁺
4165	10,647	10,647 \rightarrow 0,0	$-0,36 \pm 0,13$ $0,03 \pm 0,13$	9/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2) 9/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2)	0,005 0,229 0,229 0,005	$0,02 \pm 0,05$ $1,11 \pm 0,05$	9/2 ⁺
4176	10,658	10,658 \rightarrow 0,0	$-0,41 \pm 0,06$ $0,07 \pm 0,06$	9/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2) 9/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2)	0,005 0,230 0,230 0,005	$0,02 \pm 0,05$ $0,87 \pm 0,05$	9/2 ⁺
4182	10,664	10,664 \rightarrow 0,0	$-0,33 \pm 0,07$ $0,06 \pm 0,07$	9/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2) 9/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁻ \rightarrow 7/2 ⁻ M1(E2) 7/2 ⁺ \rightarrow 7/2 ⁻ E1(M2)	0,005 0,230 0,230 0,005	$0,02 \pm 0,05$ $0,97 \pm 0,05$	9/2 ⁺

A szögeloszlásokat a $W(\Theta) = A_0P_0 + A_2P_2 + A_4P_4$ alakú függvényekkel illesztettük, amelyeket a szövegben tárgyalt II.2. képlet alapján számítottunk ki. P_0 , P_2 , P_4 rendre a 0, 2 és 4-ed fokú Legendre polinomok. δ a különböző multipolrendű sugárzásokra vonatkozó keverési paraméter.

A 24c ábrán láthatjuk a $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ reakció gerjesztési függvényét is. A rugalmatlan proton szórási folyamatból származó γ sugárzás szögeloszlását is megvizsgáltuk az $E_p=4159$ keV, 4176 keV, 4186 keV és 4190 keV bombázó energiáknál talált rezonanciákra vonatkozóan. Az ezekre meghatározott szögeloszlások és a különféle spin értékekkel számított elméleti szögeloszlás függvények láthatók a 30–33. ábrákon. A χ^2 értékek minden esetben a $J_R=9/2$ spin feltételezéssel voltak minimálisak. Így ezeket a rezonanciákat úgy tekinthetjük, mint a $g_{9/2}$ IAR-nek a rugalmatlan proton szórási csatornában megjelenő komponenseit.

A IV. táblázat összefoglalja az öt erős IAR komponens γ bomlásának szögeloszlására vonatkozó kísérleti adatokat.

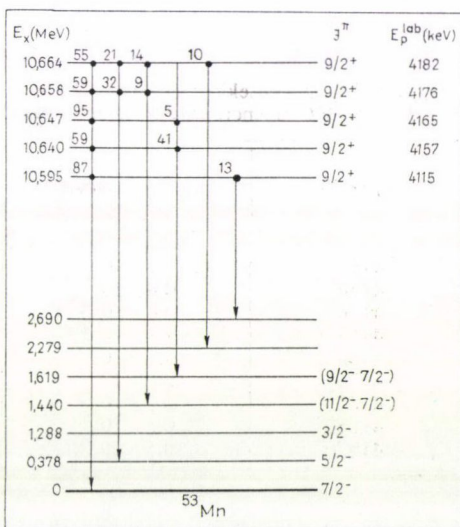
A rezonanciák γ bomlása

A 34. ábrán bemutatjuk az említett 5 erősebb rezonancia komponensre vonatkozó γ bomlási sémát, a spektrumokból, illetve gerjesztési függvényekből meghatározott elágazási arányokkal.

A ^{53}Mn magban mások méréseiből sem ismert olyan gerjesztett kötött állapot, amely a $g_{9/2}$ antianalóg állapotra ráillő követelményeknek eleget tenne. Nem találtunk a γ spektrumokban mi sem jelzést arra vonatkozóan, hogy az analóg \rightarrow antianalóg izovektor M1 átmenet megjelenne.

Valamennyi $g_{9/2}$ IAR komponens γ spektrumát az igen erős alapállapot $E1$ γ átmenet jellemzi. Ezenkívül olyan igen érdekes szerkezetű végállapotokra vezet még γ átmenet, mint pl. az $E_x(^{53}\text{Mn})=1,440$ MeV és 1,619 MeV gerjesztett állapotoké. Feltételezhetően ezek a gerjesztett állapotok úgy alakulnak ki, hogy a ^{52}Cr mag $J^\pi=2^+$ kollektív gerjesztéséhez ($E_x(^{52}\text{Cr})=1,434$ MeV) egy $f_{7/2}$ pályán levő egyrészecske csatolódik [$2^+ \otimes f_{7/2}$] $J^\pi = 11/2, 9/2, 7/2, 5/2, 3/2$ lehetséges spin értékekkel.

Ezek a végállapotok azt is jelzik, hogy az analóg állapot hullámfüggvénye már nem olyan egyszerű szerkezetű, mint a ^{57}Co magban talált $g_{9/2}$ IAR esetében. Azt, hogy az IAR szerkezetében a kollektív gerjesztett törzs fontos szerepet játszik, abból is látjuk, hogy az IAR megjelenése már a rugalmatlan szórási csatornában is erős, és a γ csatornához hasonló elosztást mutat (24c ábra). A rugalmatlan proton szórás operátora ugyanúgy egyrészecske operátor, mint a γ bomlás operátora. Itt is érvényes mindaz, amit már elmondottunk, hogy ez az operátor csak olyan kezdeti és végállapotok között létesít átmenetet, amelyek egymással közeli rokonságban vannak, azaz szerkezetük hasonló. Érdeemes megjegyezni, hogy a ^{57}Co magban talált IAR-t — más



34. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban az $E_p=4115, 4157, 4165, 4176$ és 4182 keV bombázó energiáknál talált rezonanciák γ bomlási sémái

rezonanciákkal összehasonlítva — a $(p, p'\gamma)$ folyamat gyenge volta jellemzi (Rangacharyulu 1979).

Az analóg \rightarrow antianalóg $M1$ átmenet hiánya is azt tükrözheti, hogy az IAR szerkezete bonyolult, nem tudja ezt az egyszerű szerkezetű végállapotot olyan mértékben populálni, hogy az megfelelő erősséggel jelenjen meg. Maripuu (1970) elmélete szerint a törzs gerjesztéséből származó kollektív komponens ezt a típusú $M1$ átmenetet lényegesen legyengítheti, mert az egyrészecske átmenetért felelős mátrix elem és a kollektív rész legerjesztődéséből származó mátrix elem ellentétes fázisúak.

Abszolút átmeneti valószínűségek

Úgy tűnik, hogy az egyrészecske típusú gerjesztés, vagyis az egyszerű szerkezet mégis jelentős szerepet játszik az IAR hullámfüggvényében, és ez az, ami az alapállapotot kitünteti a többi lehetséges végállapotok között. Itt nem érvényesül tiltó hatás, ez egy erős $E1$ átmenet.

V. TÁBLÁZAT

A $g_{9/2}$ IAR komponensekből a ^{53}Mn mag alapállapotára vezető γ átmenetek erősségei és az abszolút átmeneti valószínűség értékek eV-ban és Weisskopf egységekben

E_p (keV)	$\frac{\Gamma_p \Gamma_{\gamma_0}}{\Gamma_t}$ (keV)	Γ_{γ_0} (eV)	$\frac{\Gamma_{\gamma_0}}{\Gamma_{\gamma}^{\text{W.u.}}(E1)}$
4115	$1,9 \times 10^{-3}$	3,3	$2,8 \times 10^{-3}$
4134	$0,4 \times 10^{-3}$	0,7	$0,6 \times 10^{-3}$
4140	$0,4 \times 10^{-3}$	0,7	$0,6 \times 10^{-3}$
4157	$1,1 \times 10^{-3}$	1,9	$1,6 \times 10^{-3}$
4165	$3,1 \times 10^{-3}$	5,3	$4,5 \times 10^{-3}$
4176	$2,0 \times 10^{-3}$	3,5	$3,0 \times 10^{-3}$
4182	$2,0 \times 10^{-3}$	3,5	$3,0 \times 10^{-3}$
4188	$0,5 \times 10^{-3}$	0,9	$0,8 \times 10^{-3}$
4197	$0,5 \times 10^{-3}$	0,9	$0,8 \times 10^{-3}$

Az V. táblázatban foglaltuk össze a ^{53}Mn alapállapotára vezető γ átmeneti erősségeket azon a kilenc rezonancián, amelyeket a gerjesztési függvények, illetve a szögeloszlás mérések alapján a $g_{9/2}$ IAR komponenseinek tekintünk.

A $\frac{\Gamma_p \Gamma_{\gamma_0}}{\Gamma_t}$ erősségből kiszámítottuk a Γ_{γ_0} abszolút átmeneti valószínűség értékeit Galès és társai (1976) mérése alapján. Ezek a szerzők meghatározták a rugalmas és rugalmatlan proton szórási szélességeket, amelyek viszonyából a Γ_p/Γ_t hányados kapható. Természetesen, minthogy az említett szerzők az általunk felbontott komponenseket egyben határozták meg, a kísérleti felbontásnak megfelelően, ez az arány átlagérték, amely komponensről komponensre változhat. Ezt mi nem vehettük figyelembe, mert a proton csatornában független mérést nem végeztünk.

A 35. ábrán láthatjuk a $g_{9/2}$ IAR általunk talált komponenseit. Az ábrán az alapállapotra vezető γ átmenetre vonatkozó abszolút átmeneti valószínűségeket tüntettük

fel a bombázó energia függvényében. Ez az eloszlás a komponensekre felhasadt izobár analóg rezonancia képe a γ csatornában.

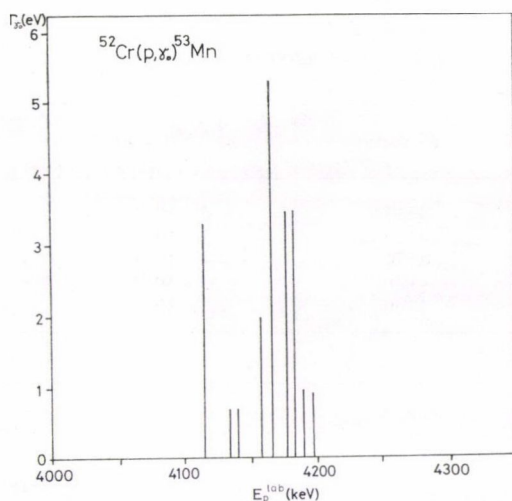
Az ilyen és ehhez hasonló erősség eloszlások nem ismeretlenek, több szerző mutatja így be mérési eredményeit az irodalomban (pl. *Bilpuch* 1976). A rugalmas proton szórási csatornában a mérések kiértékeléséből kapott γ_p^2 (redukált proton szélesség) értékek eloszlása is hasonló képet mutat az analóg rezonanciáról. Ahhoz viszont, hogy az ilyen eloszlásokból az izobár analóg rezonanciának, mint doorway állapotnak a jellemzőit meghatározzuk az szükséges, hogy a talált eloszlást valamilyen elméletileg értelmezett és kiszámított függvénnyel írjuk le. A függvény paraméterei lesznek az IAR jellemzői: pl. E_a =az analóg állapot helye, Γ_s =az analóg állapot szétszóródási szélessége, Γ_a =az analóg állapot bomlási szélessége az illető csatornában. Ezeken kívül más paraméterek is megjelenhetnek.

A III. fejezetben részletesen tárgyaljuk azokat az elméleti módszereket, amelyek alapján ilyen analízist elvégezhetünk, és diszkutáljuk a saját méréseinkből kapott eredményeket.

A $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ magreakció

A 24c ábrán láthatjuk, hogy a $g_{9/2}$ IAR feltűnően jelentkezett a rugalmatlan proton szórási folyamatban is. Láttuk, hogy a szögeloszlás mérések is alátámasztják azt a feltételezést, hogy $E_p=4117, 4159, 4176, 4186$ és 4190 keV bombázó proton energiáknál talált rezonanciák a keresett $g_{9/2}$ IAR komponensei. A rugalmatlan proton szórásban főleg a ^{52}Cr mag $E_x=1,434$ MeV ($J^\pi=2^+$) gerjesztett állapotát hoztuk létre. Ez a nivó $E_\gamma=1434$ keV γ átmenettel bomlik a ^{52}Cr mag alapállapotára. Az átmenetet a γ spektrumokban jól megfigyelhetjük. Az átmenet intenzitásából számítottuk ki a $\Gamma_p\Gamma_{p'}/\Gamma_{\text{tot}}$ erősségeket az egyes rezonanciákra vonatkozóan. A (p, γ) reakciónál már ismertetett módszerrel, a $\Gamma_p/\Gamma_{\text{tot}}$ arányt Galès és társai publikációja alapján ismertnek tételezve fel, meghatároztuk a $\Gamma_{p'}$ parciális bomlási szélességeket, valamint a $\Gamma_{p'}=2P\gamma_p^2$ összefüggés segítségével a γ_p^2 redukált bomlási szélességeket. Az összefüggésben P a penetrációs faktort jelöli, vagyis a szélesség energiafüggő részét.

Eredményeinket a VI. táblázatban foglaltuk össze.



35. ábra. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban talált $g_{9/2}$ IAR megjelenése az alapállapot γ csatornában. Abszolút átmeneti erősségek eloszlása

VI. TÁBLÁZAT

A $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ magreakcióban megtalált $g_{9/2}$ IAR komponensek erősségei és a belőlük származtatott parciális szélességek

E_p (keV)	$\frac{\Gamma_p \Gamma_{p'}}{\Gamma_t}$ (keV)	$\Gamma_{p'}$ (eV)	$\gamma_{p'}^2$ (keV)
4117	2×10^{-2}	34 ± 6	85 ± 16
4159	3×10^{-2}	55 ± 10	137 ± 26
4176	$4,4 \times 10^{-2}$	75 ± 15	187 ± 38
4186	3×10^{-2}	49 ± 10	122 ± 24
4190	$2,3 \times 10^{-2}$	40 ± 8	100 ± 20
		$\Sigma = 218 \text{ eV}$	$\Sigma = 631 \text{ keV}$

III. fejezet

DISZKUSSZIÓ

III/1. Az analóg állapotok finomszerkezetének analízise

A) Az erősségfüggvény definíciója

Tárgyalásunk kezdetén felhívjuk a figyelmet arra, hogy az erősségfüggvény fogalma a fizika több területén játszik szerepet. Beszélünk róla pl. az óriás rezonanciák tárgyalásánál, elektronok rezonancia szórásánál, egyrészeske állapotok eloszlásával kapcsolatban, stb. Igen fontos fogalom a felhasadt analóg rezonanciák értelmezésénél is.

Legyen adott egy olyan A nukleonból álló rendszerünk (Bohr—Mottelsohn 1969), amelynek teljes Hamilton operátorát

$$H = H_0 + V \quad \text{III.1.1}$$

alakban írhatjuk fel, ahol a H_0 olyan modell Hamilton operátort jelöl, amelynek „a” és „ α ” állapotok saját állapotai:

$$H_0|a\rangle = E_a|a\rangle \quad \text{III.1.2}$$

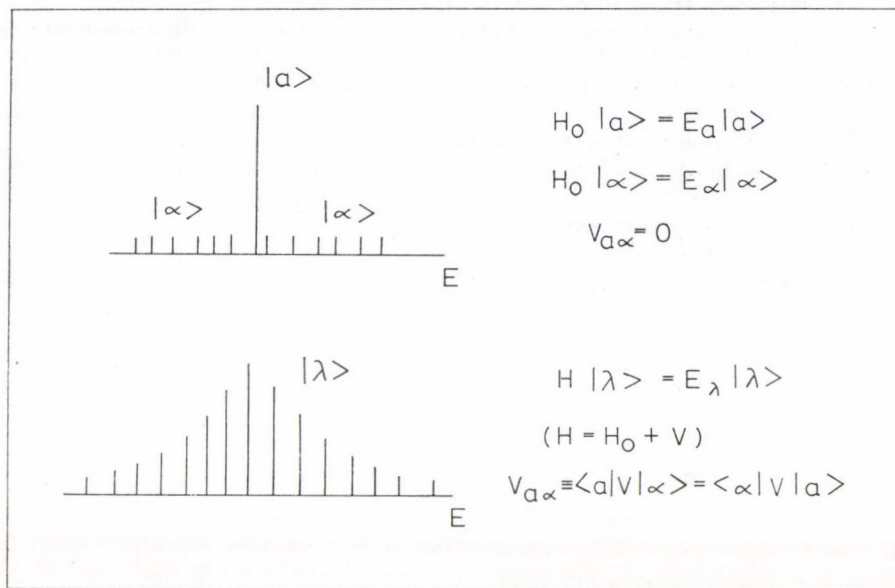
$$H_0|\alpha\rangle = E_\alpha|\alpha\rangle$$

V olyan kölcsönhatás, amely az „a” és az „ α ” állapotok között csatolást létesít:

$$\begin{aligned} V_{a\alpha} &\equiv \langle a|V|\alpha\rangle = \langle \alpha|V|a\rangle \\ \langle a|V|a\rangle &= \langle \alpha|V|\alpha\rangle = 0 \end{aligned} \quad \text{III.1.3}$$

Tételezzük fel, hogy $|a\rangle$ egy valamiféle szempontból kitüntetett állapot. Olyan konfiguráció például, ahol az A nukleon közül egy legyen adott héjmodell pályán, míg a többi nukleon kialakítja az $(A-1)$ nukleon rendszer alapállapotát. Tételezzük fel,

hogy a $|\alpha\rangle$ állapotok bonyolultabb konfigurációjúak, ahol az $(A-1)$ nukleon már nem az alapállapotot (ún. törzs) valósítja meg, hanem egy vagy több nukleon gerjesztve van (lyukrészes konfigurációk). A H_0 operátornak megfelelő spektrumot láthatjuk a 36. ábra felső részében.



36. ábra. Egy kitüntetett $|a\rangle$ állapot és a környező állapotok között lehetséges kölcsönhatások. Az ábra felső részén a kölcsönhatás mentes képben, az $|a\rangle$ megőrzi individualitását. Az ábra alsó részén a kölcsönhatás következtében $|a\rangle$ komponensekre hasadt fel, azaz erőssége eloszlott a környező $|\alpha\rangle$ állapotokra. A vonalak magassága a redukált szélességet jelzi

Ha a V kölcsönhatás nem működik, az $|a\rangle$ és $|\alpha\rangle$ állapotok redukált szélességei a független részecske modell szerint ilyen eloszlást mutatnak a gerjesztési energia függvényében.

Amikor a V kölcsönhatás összekeveri az $|a\rangle$ és az $|\alpha\rangle$ állapotokat, kialakul egy olyan rendszer, amelynek Hamilton operátora H és sajátállapotai $|\lambda\rangle$

$$H|\lambda\rangle = E_\lambda |\lambda\rangle, \quad \text{III.1.4}$$

ahol

$$|\lambda\rangle = c_a(\lambda)|a\rangle + \sum_\alpha c_\alpha(\lambda)|\alpha\rangle \quad \text{III.1.5}$$

és a sajátérték egyenlet

$$E_a - E_\lambda = \sum_\alpha \frac{V_{a\alpha}^2}{E_\alpha - E_\lambda}. \quad \text{III.1.6}$$

A c_a és c_α együtthatókra az alábbi összefüggések érvényesek

$$c_\alpha(\lambda) = -\frac{V_{a\alpha}}{E_\alpha - E_\lambda} c_a(\lambda)$$

és

$$c_a(\lambda) = \left(1 + \sum_x \frac{V_{ax}^2}{(E_x - E_\lambda)^2} \right)^{-1/2}. \quad \text{III.1.7}$$

A $c_a(\lambda)$ az $|a\rangle$ állapot tulajdonságainak a λ spektrumra való eloszlását adja meg. Ezt nevezzük erősségfüggvénynek. A $|\lambda\rangle$ állapotok, illetve a H operátor spektruma látható a 36. ábra alsó felében. A $|\lambda\rangle$ állapotok sűrűsége olyan nagy lehet, hogy definiálnunk kell egy folytonos erősségfüggvényt, $(P_a(E))$, amely megadja az $|a\rangle$ állapotnak egységnyi energia intervallumra eső erősségét. Ezt megkapjuk, ha a megfelelő energia intervallumban átlagolunk a $|\lambda\rangle$ állapotokra.

Az erősségfüggvény kiszámításához feltevéseket kell tennünk az $|\alpha\rangle$ állapotokra és a $V_{a\alpha}$ kölcsönhatás mátrix elemeire vonatkozóan. Tegyük fel, hogy

1. E_α energiák egyenletesen oszlanak el, egymástól D távolsággal,

2. V összes mátrix elemei konstansok, $V_{a\alpha} = v$. Ezek az ún. „picket fence” modell kikötései. Ezekkel a feltételekkel, valamint a $v \gg D$ feltevésével azt kapjuk, hogy az erősségfüggvény

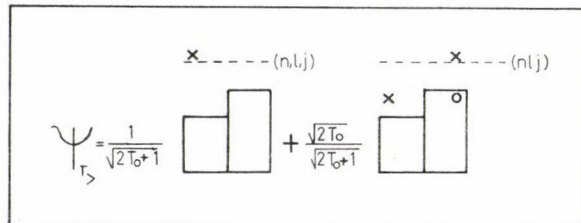
$$P_a(E) = \frac{1}{D} c_a^2(E_\lambda \approx E) = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{(E_a - E)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad \text{III.1.8}$$

alakú és

$$\Gamma = 2\pi \frac{v^2}{D} \quad \text{III.1.9}$$

szélesség jellemzi.

Esetünkre alkalmazva a fenti megfontolást, az $|a\rangle$ állapot reprezentálja az izobár analóg rezonanciát, amely egyszerű szerkezetű (37. ábra) és $T_> (=T_0 + 1/2)$ izospin kvantumszám jellemzi. Az $|\alpha\rangle$ állapotok jelentik az IAR környezetében található olyan bonyolultabb konfigurációjú állapotokat, amelyekhez $T_< (=T_0 - 1/2)$ izospin érték tartozik. A Coulomb kölcsönhatás ezeket összekeveri, és létrejön a $|\lambda\rangle$ állapotok sorozata, amely az IAR-nek a környező állapotokra való eloszlását képviseli. Ezt jellemzi a Γ szélesség, amely az IAR esetében is a doorway állapotnak szétszóródási szélessége (Γ^+), amint az a *Feshbach, Kerman, Lemmer* (1967) modellben definiálva van. Ez méri az állapotok keveredését okozó kölcsönhatást, mert egyértelmű összefüggésben van a $V_{a\alpha}$ mátrix elem négyzetével. Már itt meg kell jegyeznünk azt a tényt, hogy az IAR szétszóródási szélességét ($\Gamma_s = \Gamma^+$) két különböző fizikai jelenség okozza. Erről a IV. fejezetben még részletesen szó lesz. Ezek egyike a „belső keveredés”, ami az izobár analóg állapotnak a Coulomb kölcsön-



37. ábra. Analóg állapot hullámfüggvényének szerkezete egyszerű esetben.

hatás által történő szétszóródása, és amelyet az általunk tárgyalt kép (36. ábra) jellemez. A másik tényező a „külső keveredés” vagy „határfeltétel keveredés”, amelynek oka a proton hullámfüggvényének eltorzítása a mag Coulomb tere által. Bizonyos esetekben az egyik vagy másik típusú keveredés elhanyagolható, de lehetséges, hogy mindkettő felelős az IAR szétszóródásáért (*Mahaux—Weidenmüller* 1967).

A komponensekre felhasadt analóg rezonanciák jellemző paramétereit csak erősfüggvényük meghatározásával kapjuk meg.

B) IAR finomszerkezet analízisének módszerei

A kísérletekben a $|\lambda\rangle$ állapotok jelennek meg, mint a felhasadt IAR komponensei. Ennek az a feltétele, hogy mérőrendszerünk felbontása elegendően jó legyen ezen állapotok szétválasztására adott nívósűrűség mellett.

Az 150—300 eV-os felbontással végzett rugalmas és rugalmatlan proton szórási mérésekben ez teljesült. Ennek következményeképpen a proton csatornáknban talált redukált szélességek eloszlásainak analízise megtörtént már évekkel ezelőtt. Az IAR erősfüggvény meghatározásának módszerét a részecske csatornákra dolgozták ki (*Di Toro* 1970, *Kerman* and *De Toledo Piza* 1968, *Mekjian* and *MacDonald* 1967 és *MacDonald* 1978). A rugalmas, illetve rugalmatlan proton csatornában mért gerjesztési függvényeket a Wigner—Eisenbud-féle R mátrix elmélet alapján felírt többcsatornás és többnívós formula segítségével analizálták. Az eljárás eredménye az E_λ rezonanciaenergiák és $\gamma_{\gamma c}^2$ redukált szélesség értékek a szóban forgó „c” csatornára vonatkozóan. Ezek a Wigner—Eisenbud-féle R mátrix pólusai és reziduukai, amelyek az elmélet szerint is valós értékek. Ezen kívül ebben az elméletben a $\gamma_{\lambda c}^2$ értékek eloszlása az energiafüggvényében Lorentz függvénnyel írható le, és ez az eloszlás Γ -tól, az IAR bomlási szélessége a „c” csatornában, független. Ez a kiindulási alapja a finomszerkezet MacDonald—Mekjian-féle elméletének.

Ezzel szemben a vonalkiszélesedés jelenségének (IAR felhasadás) Lane-féle tárgyalása (*Lane* 1969) a Kapur—Peierls magreakció elméletben definiált S mátrix használatán alapul (*MacDonald* 1979). Tekintettel arra, hogy ebben komplex határfeltételek és sajátértékek használatosak, eredményül komplex pólusok és reziduukai adódnak a valós rezonancia energia és redukált szélességek helyett. Az S mátrixból származtatott redukált szélességek energiafüggése (eloszlása) is minőségileg különbözik a Wigner—Eisenbud R mátrixból kapott $\gamma_{\gamma c}^2$ eloszlástól, mivel az előbbi nem Lorentz függvényalakot követ (*Mahaux—Weidenmüller* 1967).

A kísérletekből az R mátrix analízissel nyert eredmények értelmezésére a Wigner—Eisenbud R mátrix tárgyalással ekvivalens K mátrix formalizmuson felépített magreakció elmélet tűnik a legalkalmasabbnak. *Mekjian* és *MacDonald* (1967), valamint *Kerman* és *De Toledo Piza* (1968) és *MacDonald* (1978)-ban ennek alapján dolgozták ki az IAR-ek finomszerkezetének analízisére vonatkozó elméletüket. Tekintsük át az 1967-ben és 1978-ban kidolgozott kétféle módszert.

a) *Mekjian és MacDonald (1967)*

az $^{40}\text{Ar}(p, p_0)^{40}\text{Ar}$ magreakcióban talált $p_{3/2}$ IAR komponensek analizésére alkalmazták az alábbi módszert. A $\gamma_p^2(E)$ kísérleti erősség eloszláshoz a

$$\Gamma_\lambda = \Gamma_h \frac{(E_\lambda - E_a - \Delta)^2}{(E_\lambda - E_a)^2 + (\Gamma_s/2)^2} \quad \text{III.1.10}$$

függvényt illesztették, ahol Γ_s jelenti az IAR szétszóródási szélességét, $E_\lambda = a$ λ -adik komponens energiája, E_a az analóg állapot pozíciója, amit szeretnénk megkapni, Γ_h az IAR-tól nagy távolságban megjelenő szélességek az adott csatornában, azaz a háttér. Δ aszimmetria paraméter. A paraméterek között az alábbi összefüggések, illetve azonosságok állnak fenn:

$$\Gamma_s \equiv \Gamma_{in} \left[1 + \frac{D^2}{\pi^2 |V_{ha}|^2} \right]^{1/2}; \quad \Gamma_{in} = 2\pi \frac{|V_{ha}|^2}{D}$$

$$\Delta \equiv \left[\frac{V_{ha}}{(\Gamma_h \cdot \Gamma_a^\dagger)^{1/2}} \right] \Gamma_a^\dagger, \quad \text{III.1.11}$$

ahol D az átlagos nívótávolság, a V_{ha} mátrix elem (az előzőekben V_a) felelős a 2 részecske — 1 lyuk bonyolultsági fokú analóg állapot és az IAR környezetében található egy fokkal bonyolultabb; 3 részecske — 2 lyuk szerkezetű ún. „hallway” állapotok közötti csatolásért. Γ_a^\dagger az analóg állapot bomlási szélessége az illető csatornában.

b) *Az 1978-ban kidolgozott MacDonald-féle módszer*

az IAR komponensek analizésére ill. a belőlük származtatható erősségfüggvény meghatározására az alábbiakban foglalható össze.

Első lépésként a mérésekből meghatározott $\gamma_{\lambda c}^2$ eloszlást Lorentz súlyfaktorial I értékre átlagoljuk $\left(I \gg \frac{D}{2} \right)$ és ezzel egy folytonos, „kísérleti” erősségfüggvényt generálunk:

$$S_{(E, I)}^{\text{kísér.}} \equiv \left\langle \frac{\gamma_{\lambda c}^2}{D_\lambda} \right\rangle = \frac{I}{\pi} \sum_\lambda \frac{\gamma_{\lambda c}^2}{(E - E_\lambda)^2 + I^2}. \quad \text{III.1.12}$$

Második lépésben az elméletből származó IAR erősségfüggvényt és a „kísérleti” erősségfüggvényt egymáshoz illesztjük. Ez történhet pl. legkisebb négyzetek módszerével. Ebből az illesztésből az elméleti erősségfüggvény paramétereit kapjuk, amelyek a tanulmányozott IAR jellemző adatai lesznek. Az elméleti IAR erősségfüggvényt az alábbi kifejezés írja le:

$$S_{(E, I)}^{\text{elm.}} = S_0 + \frac{\Gamma_a^\dagger}{\cos \varphi} \frac{\left(\frac{\Gamma_s}{2} \cos 2\varphi - (E - E_a) \sin 2\varphi \right)}{(E - \bar{E}_a)^2 - \left(\frac{\Gamma_s}{2} \right)^2} \quad \text{III.1.13}$$

ahol

$$\Gamma_s = \Gamma_a^\dagger + 2I; \quad \bar{E}_a = E_a + \Delta_I; \quad S_0 = \left\langle \frac{\Gamma_h^\dagger}{D} \right\rangle$$

és

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{\left\langle \frac{V_{az} \Gamma_h^\dagger}{D} \right\rangle}{\Gamma_a^{\dagger 1/2}}.$$

Az eloszlást meghatározó paraméterek tehát az E_a az analóg állapot helye Δ az IAR eltolódása, Γ_a^\dagger az analóg állapot bomlási szélessége az adott csatornában, $\Gamma_a^\dagger = 2\pi \left\langle \frac{V_{az}^2}{D} \right\rangle$ az IAR szétszóródási szélessége, φ az aszimmetria paraméter, amely az erősségfüggvénynek a kísérletekben többször tapasztalt aszimmetrikus alakját írja le, végül $S_0 = \left\langle \frac{\Gamma_h^\dagger}{D} \right\rangle$ az a háttér erősségfüggvény, amelyet a környező állapotoknak a „c” csatornára vonatkozó bomlási szélessége, Γ_h^\dagger határoz meg, és amely az IAR jelenléte nélkül megvalósulna. Ehhez az értékhez tart az erősségfüggvény az analóg rezonanciától nagy távolságban.

Az erősségfüggvény meghatározására alkalmazott fenti eljárás érvényes, bármilyen is a háttér állapotok (E_x) eloszlása, és a V_{az}^2 mátrixelemek tulajdonsága. Az átlagolástól független paraméter értékeket csak úgy kapunk, ha az átlagolási intervallum I nagyobb, mint Γ_a^\dagger .

C) Erősségfüggvény a gamma csatornában

A dolgozat előző fejezeteiben bemutattuk, hogy az izobár analóg rezonanciákat — még akkor is, ha komponensekre hasadtak fel — megtalálhatjuk a gamma csatornában is. Nem mindegy azonban, hogy melyik gamma átmenetet figyeljük meg ebből a célból, mert láttuk, hogy csak az a kitüntetett gamma átmenet jelzi az IAR jelenlétét, amelyhez tartozó végállapot az analóg állapot szerkezetével igen közeli rokonságot mutat. A (p, γ) reakcióban megtalált IAR komponensek analízise úgy történt, hogy a

$$\frac{\Gamma_p \Gamma_\gamma}{\Gamma_{\text{total}}}$$

értékből a már ismertetett feltevésekkel kiszámítottuk a Γ_γ abszolút átmeneti valószínűségeket. Ez a mennyiség a rugalmas szórás mérésekből származtatott γ_p^2 redukált proton szélesség értékkel ekvivalens fizikai jellemzője az illető finomszerkezeti állapotnak.

Beláthatjuk, hogy amikor az analóg állapot $|a\rangle$ és a végállapot $|f\rangle$ közötti átfedési integrál $|\langle f|a\rangle|^2 \sim 1$ azaz a kezdeti és végállapot konfigurációk nagyon hasonlóak, akkor a Γ_γ átmeneti valószínűség, amely az átmenetet létesítő multipoloperátor mátrix elemének négyzetével arányos,

$$\Gamma_\gamma = 8\pi k \sum_{M, M_f} |\langle J_f, M_f T_f | H(L, M) | J_a, M_a, T_a \rangle|^2 \quad \text{III.1.14}$$

szintén számottevő érték lesz. $H(L, M)$ az elektromágneses átmenet operátora. Nyilvánvaló tehát a $|\langle f|a\rangle|^2$ és a Γ_γ értékek közötti korreláció. Amikor az $|a\rangle$ állapot felhasad és a $|\lambda\rangle$ állapotokra eloszolva jelenik meg, akkor is a $|\langle f|\lambda\rangle|^2$ érték nagyságá-

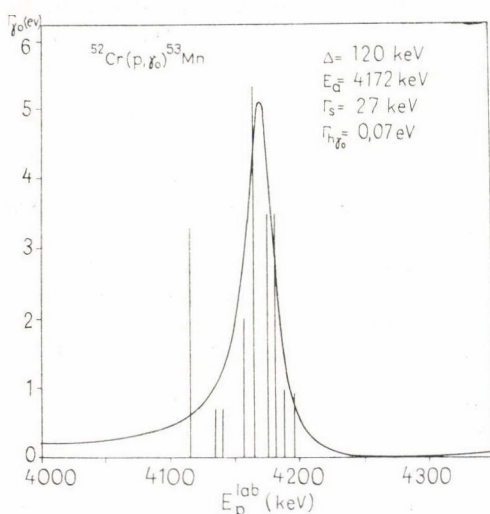
tól függ az IAR λ -adik komponensére vonatkozó $\Gamma_{\lambda\gamma}$ abszolút átmeneti valószínűség. A $\Gamma_{\lambda\gamma}$ értékek mértékei lesznek az IAR erősség jelenlétének a $|\lambda\rangle$ állapotban. (Természetesen azt feltételezve, hogy a végállapotok egészen egyszerű konfigurációt — pl. törzs+1 részecske — tartalmaznak.) Ilyen módon a $\Gamma_{\lambda\gamma}$ értékek eloszlása ugyancsak a doorway erősség eloszlására jellemző Lorentz függvény alakot mutatja.

A 35. ábrán láthatjuk ezt az eloszlást az általunk vizsgált $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ magreakció esetében. Ez az eloszlás aszimmetrikus alakú.

Az eloszlás analizisét a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ magreakció esetében kétféle módon végeztük el.

D) A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban talált $g_{9/2}$ IAR erősségfüggvényének analizise két módszerrel

a) Saját mérési eredményeink analizálására a B/a pontban ismertetett $\Gamma_\lambda(E)$ függvényt illesztettük, először a legkisebb négyzetek módszerével a kísérleti pontokhoz. A 38. ábra mutatja az illesztés eredményét. Így megkaptuk azokat a paramétereket, amelyek ezt a függvényt leírják.



Ilyen módon az IAR-t jellemző valódi paraméterekhez ezek állnak a legközelebb. Fogalmazhatjuk ezt úgy is, hogy megkapjuk az IAR-t jellemző paramétereket. A Γ_h érték leolvasható nagy távolságban az IAR-tól az eloszlásfüggvény aszimptotikus alakjából. E_a az IAR helye, és ez az eloszlás maximális pontjának helye is, ha $\Gamma_h \ll \Gamma_{\max}$. Az aszimmetria paraméter $\Delta = E_s - E_a$ azt az energia távolságot jelenti, amely a maximum helye, és a függvény zérus helye között található. Γ_s az eloszlásnak félmagasságnál mért szélessége. A paraméterek között még az alábbi egyszerű összefüggés is fennáll:

$$\left(\frac{\Gamma_s}{2\Delta}\right)^2 = \frac{\Gamma_h}{\Gamma_{\max}} \quad \text{III.1.15}$$

38. ábra. A 35. ábrán is látható erősség eloszlás (Γ_{γ_0} értékek az energia függvényében) és a hozzá illeszthető Γ_λ eloszlásfüggvény, a $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ reakcióban megfigyelt $g_{9/2}$ IAR esetében

V_{ha} a Γ_s paraméternek a III.1.11. pont alatti definíciójából megkapható.

A ^{53}Mn mag alapállapotára vezető γ sugárzásban megtalált $g_{9/2}$ IAR komponensek erősség eloszlásából ilyen módon az alábbi paramétereket kaptuk:

$$\Gamma_{h\gamma_0} = 0,07 \text{ eV}$$

$$E_a = 4172 \text{ keV}$$

$$\Delta = 120 \text{ keV}$$

$$\Gamma_s = 27 \text{ keV.}$$

Ezen adatokat úgy nyertük, hogy a $J^\pi=9/2^+$ állapotokra vonatkozóan $D_{9/2^+}=12$ keV átlagos nivótávolságot tételeztünk fel, ami a Gilbert és Cameron (1965) által megadott formula alapján számított $D_{9/2^+} \sim 10$ keV-vel jó egyezésben van. Ugyanilyen jó egyezést találtunk a spinekre való tekintet nélküli átlagos nivótávolság esetében is. Méréseink alapján ez a ^{53}Mn magban $E_x \sim 10$ MeV-en $\bar{D} \sim 1$ keV-nek adódott, míg a Gilbert—Cameron formulával $\bar{D}=1,4$ keV-et számítottunk.

A csatolást létesítő mátrix elem értékére $V_{ha}=6,4$ keV adódott méréseinkből, a fenti analízis során. Ez nagyságrendben ugyanakkora, mint amit az $^{40}\text{Ar}(p, p_0)^{40}\text{Ar}$ reakcióban talált felhasadt $p_{3/2}$ IAR esetében is mértek. Ott $V_{ha}=7,6$ keV volt.

Az IAR bomlási szélessége a γ_0 csatornában kapható a komponensekre érvényes összeg szabályból,

$$\Gamma_{\gamma_0} = \sum \Gamma_{\gamma_{oi}} - \sum \Gamma_{h\gamma_{oi}} = 20,4 \text{ eV}$$

és ezenkívül a

$$\Gamma_{\gamma_0} = \Gamma_a = \frac{2\pi A^2}{D} \cdot \frac{\Gamma_h}{\Gamma_s} \quad \text{III.1.16}$$

összefüggésből

$$\Gamma_{\gamma_0} = 21 \text{ eV} \text{ adódik.}$$

Az illesztés jó minőségét bizonyítja az is, hogy ez a kétféle módon meghatározott mennyiség ilyen jó egyezésben van. A legnagyobb bizonytalanság ennél a módszer-nél Γ_s meghatározásában van, ami az 50%-ot is elérheti.

Ezt küszöbölte ki a MacDonald-féle 5 paraméteres erősségfüggvény módszer, amely a B/b pontban került ismertetésre.

b) A MacDonald (1978) féle 5 paraméteres erősségfüggvény módszer szerinti analízis

A 39. ábrán láthatjuk a III.B/b fejezetben ismertetett módszer alapján a kísérletileg mért erősség eloszlásnak (lásd 35. ábra) Lorentz görbével történt átlagolását, különböző I átlagolási energiák esetén. Az ábra egyes lépésekben feltünteti az $S^{\text{kisér.}}(E, I)$ „kísérleti” függvényt és a számított 5 paraméteres elméleti eloszlásfüggvényt, $S^{\text{elm.}}(E, I)$. Látható, hogy $I=40$ keV átlagolási intervallum esetén már gyakorlatilag nem tér el egymástól a két függvény. Ebben az esetben az elméleti függvény paramétereit az IAR jellemző adatait adják. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ magreakcióban talált $g_{9/2}$ analóg rezonanciára ebből az illesztésből az alábbi jellemzőket lehet meghatározni:

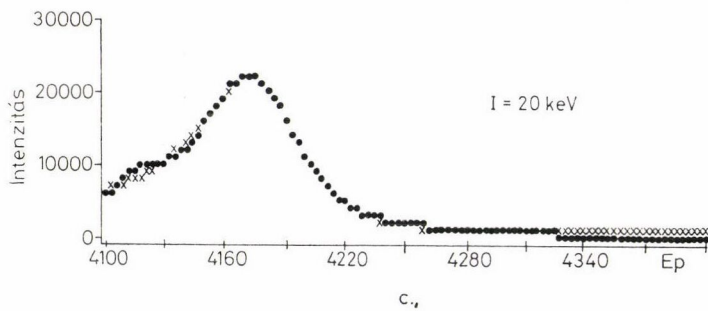
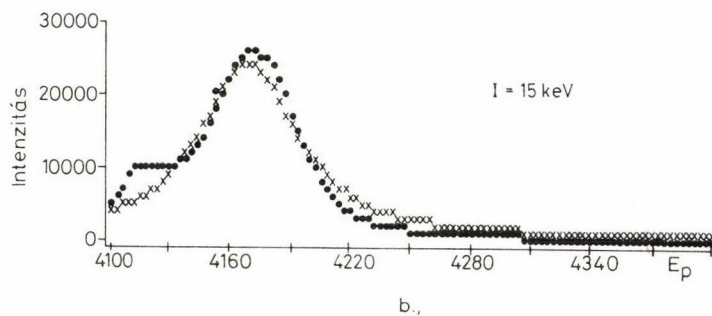
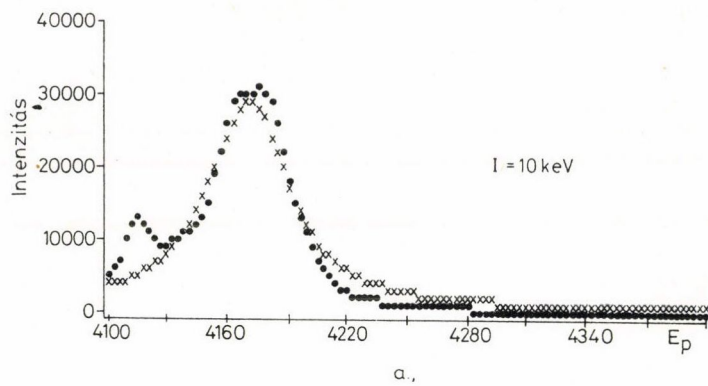
$$\Gamma_{h\gamma_0} = 0,007 \text{ eV} \pm 0,003 \text{ eV}$$

$$E_a = 4176 \text{ keV} \pm 0,5 \text{ keV}$$

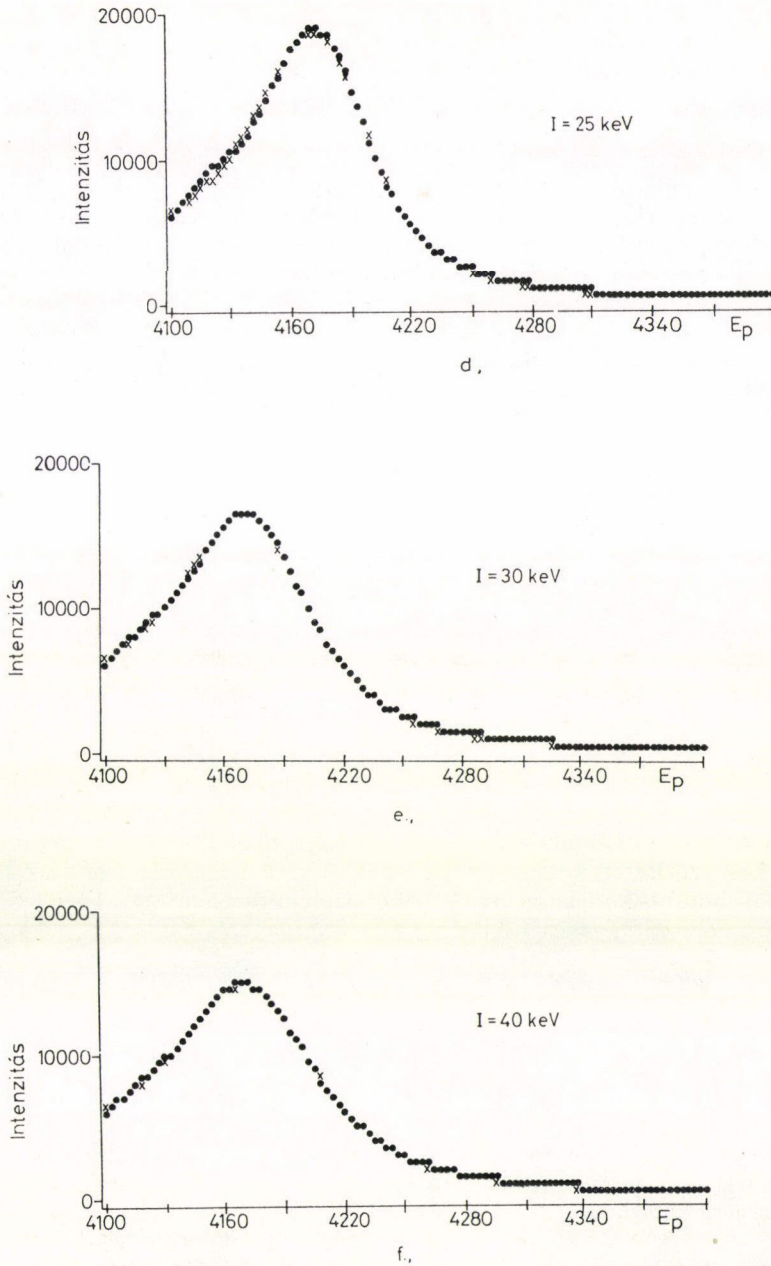
$$\Gamma_s = 23,5 \text{ keV} \pm 0,4 \text{ keV}$$

$$\Gamma_{\gamma_0} = 20,7 \text{ eV} \pm 0,1 \text{ eV}$$

Ezen paraméterek jó egyezésben vannak az a) pontban tárgyalt analízis eredményeivel. Mindazonáltal az 5 paraméteres erősségfüggvény meghatározási módszer előnye az, hogy pontosabb és kevesebb komponens esetén is jól alkalmazható, és értelmes választ tud adni a szétszóródási szélességre vonatkozó kérdéseinkre. Előfordulhat, hogy pl. három megtalált IAR komponensből kellene meghatároznunk 5 ismeretlen



39. ábra



39. ábra. A 35. ábrán feltüntetett Γ_{γ_0} erősségeloszlás I átlagolási intervallummal Lorentz függvény alakkal átlagolva (pontok) $S^{kis}(E, I)$ valamint az ehhez tartozó elméleti 5 paraméteres erősségfüggvény (keresztek) $S^{elm}(E, I)$

paramétert. A 39. ábra jól szemlélteti, hogy a komponensek nem mint a keresett függvény pontjai jönnek számításba, hanem az átlagolás során ezek segítségével egy folytonos függvényt generálunk $S^{\text{kisérlet}}(E, I)$, amelynek a mérésekkel szoros kapcsolata van, ha nem is határoztuk meg mérésrel ennek minden pontját. Az $S^{\text{kisérlet}}(E, I)$ megszerkesztésénél az az ismeretünk segít, hogy a függvény alakját már az elméleti vizsgálatokból tudjuk, amely szerint ez az eloszlásfüggvény Lorentz görbe alakú. Ebből a folytonos „kísérleti” függvényből határozzuk meg illesztéssel az 5 paraméteres elméleti függvényt, ami már minden nehézség nélkül lehetséges.

A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma_0)^{53}\text{Mn}$ magreakció esetében ezt az illesztést számunkra *W. MacDonald* (University of Maryland, USA) professzor végezte el.

Az általunk végzett egyszerűbb analízistől eltérés csak a háttér gamma szélességben található, amely azzal magyarázható, hogy mi az illesztést egy szűkebb bombázó energiatartományban végeztük el. A lényeges IAR paraméterek hibán belül egyezésben vannak.

c) Az IAR hullámfüggvény szerkezete a Γ_{γ_0} érték alapján

Az előbbi fejezetekben már ismertetett egyrészecske becslés a II.1 formula alapján az elméletileg várható szélességre a $^{53}\text{Mn } g_{9/2}$ IAR \rightarrow alapállapot közötti γ átmenet esetén $\Gamma_{\gamma_0} = 39$ eV-ot ad. A mért és elméletileg becsült értékek közötti eltérés a spektroszkópiai faktorok hibáiból adódhat, de ez nem nagyobb, mint 20%. Eltérést okozhat az IAR hullámfüggvényének szerkezete is. Az a tény, hogy a $g_{9/2}$ IAR meglehetősen erősen jelentkezik a rugalmatlan protonszórási folyamatban, arra utal, hogy a gerjesztett törzset tartalmazó komponens is szerepet játszik az IAR hullámfüggvényében. Ez természetesen csökkenti a végállapottal való rokonság fokát, tehát a γ átmeneti valószínűségeit.

A $^{63}\text{Cu}(p, \gamma)^{64}\text{Zn}$ magreakció esetében használt gondolatmenetet alkalmazva itt is meghatározhatjuk az egyszerű szerkezetű komponens amplitúdóját a hullámfüggvényben. A mért és számított Γ_{γ_0} értékek összevetéséből 53 % egyszerű szerkezetű (normál IAR szerkezet) komponenst kapunk és 47 %-ban a gerjesztett törzset tartalmazó bonyolultabb konfigurációt. A ^{53}Mn magban megtalált $g_{9/2}$ IAR hullámfüggvénye az alábbi kifejezéssel írható le:

$$\begin{aligned} \psi_{g_{9/2}}^{\text{IAR}} &= a\varphi^{\text{IAR}} + b\varphi_{\text{gerj. } 2^+}^{\text{IAR}} = \sqrt{0,53} \varphi^{\text{IAR}} + \sqrt{0,47} \varphi_{\text{gerj. } 2^+}^{\text{IAR}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2T_0 + 1}} [a[p_j C] + (2T_0)^{1/2} |n_j A] + b[p_k C^*] + (2T_0)^{1/2} |n_k A^*] \quad \text{III.1.17} \end{aligned}$$

ahol a φ^{IAR} a ^{52}Cr magot alapállapotban tartalmazza a rajta kívül a $g_{9/2}$ héjmodell pályán helyet foglaló protonnal + a 2 részecske — 1 lyuk konfigurációban. A $\varphi_{\text{gerj. } 2^+}^{\text{IAR}}$ az analóg konfigurációt képviseli úgy, hogy benne a ^{53}Cr mag $J^\pi = 2^+$ kvadrupol gerjesztésben van és ezen a gerjesztett törzsen kívül helyezkedik el a proton megfelelő héjmodell pályán. (C^* és A^* a gerjesztett törzset képviseli). Hasonlítsuk össze ezt az eredményt *Galès* (1976) és *társai* által a $^{52}\text{Cr}(^3\text{He}, dp)$ reakció tanulmányozásából kapott eredménnyel a $g_{9/2}$ IAR-re vonatkozóan. Az általuk meghatározott parciális proton szélességek az IAR-re: rugalmas csatornára $\Gamma_{p_0} = 320$ eV és a rugalmatlan csatornára a komponenseket összeszámolva $\Gamma_{p'}(2^+) = 230$ eV. Hasonlítsuk

össze ezt a $\Gamma_{p'} = 230$ eV értéket az általunk mért $\Gamma_{p'} = 218$ eV értékkel, amely a VI. táblázatban látható. Ezek aránya is azt tükrözi, hogy az egyszerű szerkezetű IAR konfiguráció 58%-ban van jelen, és a kollektív gerjesztett törzs is jelentős, mintegy 42%-ban játszik szerepet. Ez teljes összhangban van az IAR hullámfüggvényére a gamma csatornában talált evidenciákkal.

E) A $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióban talált $g_{9/2}$ IAR komponensek analízise a MacDonald-féle 5 paraméteres módszerrel

A VI. táblázatban foglaltuk össze a rugalmatlan proton szórási csatornában, illetve a hozzá tartozó γ csatornában talált komponensekre vonatkozó $\Gamma_{p'}$ parciális proton szélességeket. Feltüntettük a megfelelő energia független mennyiségeket ($\gamma_{p'}^2$) is. Ennek az 5 komponensnek az analízise is megtörtént a MacDonald-féle 5 paraméteres erősségfüggvény meghatározásával.

Eredményül $I=20$ keV átlagolási intervallum esetén a már ismertetett eljárás alkalmazásával az alábbi paraméterek adódtak:

$$\Gamma_h = -0,17 \pm 0,2 \text{ keV}$$

$$E_a = 4178 \pm 0,3 \text{ keV}$$

$$\Gamma_s = 15,3 \pm 0,6 \text{ keV}$$

$$\gamma_{p'}^2 = 632 \pm 6 \text{ keV}.$$

Látjuk, hogy az IAR helye a γ csatornában meghatározott E_a energiához képest 2 keV-el különbözik, ami nem kísérleti hiba, hanem a különböző csatornában megjelenő rezonanciák a szélességen belül egymáshoz képest el lehetnek tolódva (Feshbach 1978). Γ_s szétszóródási szélesség viszont sokkal kisebbnek adódik itt, mint a másik csatorna esetén. Ennek tárgyalására még a IV. fejezetben visszatérünk. A $\gamma_{p'}^2$ érték viszont jól egyezik a VI. táblázatban feltüntetett $\Sigma \gamma_{ip'}^2 = 631$ keV értékkel, amivel az összesszabály szerint meg kell egyeznie. Γ_h értéke jelen esetben gyakorlatilag zérusnak adódik.

III/2. Megállapítások a felhasadt IAR-ek tulajdonságaira vonatkozóan

A II. fejezetben tárgyalt magreakciók vizsgálatából, valamint az elmúlt évek során tanulmányozott egyéb izobár analóg rezonanciák tulajdonságaiból érdekes törvényszerűségeket ismertünk fel, amelyek a felhasadt analóg állapotokat jellemzik. Bilpuch (1976) és társai közöltek egy nagyobb méretű összefoglaló munkát, amely a részecske csatornában és bizonyos gamma csatornában végzett kísérleteket tartalmazza számos céltárgymag esetében. Saját tapasztalataink alapján tesszük most kritikai vizsgálat tárgyává ennek a dolgozatnak egyes módszereit és megállapításait, mert ezeket nemcsak itt, hanem az irodalomban máshol is megtalálhatjuk (Keyworth et al 1966, Lane et al 1974, stb.). A következőkben bemutatjuk, hogy az elméletben régen megfogalmazott (Mekjian and MacDonald 1968) megállapítások hogyan tükröződnek ma a felhasadt analóg állapotok vizsgálatánál.

Mindezek megvilágításához — mivel az általunk talált kísérleti jelenségeknek ez a kulcsa — szükségünk lesz arra, hogy a felhasadt analóg állapotok szerkezetével foglalkozó elméletbe egy kicsit mélyebben betekintsünk. Előbb azonban tekintsük át még egyszer a problémát okozó területeket.

A) Izobár analóg rezonanciák megjelenése a különböző csatornában

Eddigi tárgyalásunkból kiderült, hogy egy analóg rezonancia megjelenhet a rugalmas proton szórásán kívül egyéb reakció csatornában is. Saját kísérleteinkben is már láttuk a rugalmatlan proton szórásban, azaz $(p, p' \gamma)$ csatornában megjelenni az analóg rezonanciát (lásd 24c ábra) és még számos példát találunk erre a már említett összefoglaló cikkben (Bilpuch 1976). A gamma csatornában megtalált IAR-ekről sok kísérleti munka számol be, amelyeket most nem idézünk.

Belátható, hogy a különböző csatornák, amelyekben az analóg állapot megjelenik, egymással korrelációban vannak. A korreláció tényét hamar felismerték (Peters 1972, Mitchell 1972) és sokat tanulmányozták (Lane 1974). Fel kell hívnunk azonban a figyelmet néhány elkövetett hibára, és a tapasztalatokból bizonyos következtetéseket kell levonnunk (Fodor 1980).

a) Korreláció a rugalmas proton szórás és a gamma csatornák között

A legtöbb hibát ezen a területen követték el a kutatók. Az IAR vizsgálati módszer abban állt, hogy megmérték a rugalmas proton szórás gerjesztési függvényét (természetesen több szögben) és meghatározták az IAR komponenseket ill. azok pozícióit a már ismertetett eljárással, megkeresve az R mátrix pólusait és reziduumait. Az így meghatározott E_λ energiáknál vannak a keresett rezonanciák, az IAR komponensei. Ezután a gamma csatorna vizsgálatára két módszert alkalmaztak, de az esetek nagy százalékában mind a kettő hibás. Ezek:

1. Az E_λ bombázó protonenergiáknál megmérték a rezonanciák γ spektrumát. Valahol, rezonancián kívül mértek szintén γ spektrumot, és ezt, mint háttérrel tekintve határozták meg az egyes rezonanciák γ átmeneteit. Ez az eljárás a háttér helytelen meghatározása miatt nem fogadható el, így nem lehet valódi elágazási arányokat kapni a γ átmenetekre. Előfordulhat, hogy E_λ közelében más spin és paritás értékkel rendelkező rezonancia van jelen, — amit talán a rugalmas csatornában nem is látunk — és a γ spektrum mérésére alkalmazott vastagabb céltárgy miatt a rezonancia nem válik el az általunk vizsgált λ -adik IAR komponensétől. Ekkor a γ spektrumban levő átmenetek a két rezonanciából származnak, és hibás feltevés, ha azokat csak az IAR komponensnek tulajdonítjuk.
2. A dolgozat bevezető fejezeteiben már említettük, hogy sok esetben használtak integrális típusú gerjesztési függvényeket a γ csatornában. Erre találunk példát a már említett összefoglaló cikkben is (Bilpuch 1976), ahol a γ spektrumnak összes, $1 \text{ MeV} < E_\gamma < 5 \text{ MeV}$ energiájú, vagy $E_\gamma > 1,5 \text{ MeV}$ γ átmenetet mértek egybe. A gerjesztési függvényt így határozták meg pl. a $^{58}\text{Fe}(p, \gamma)^{59}\text{Co}$ és a $^{62}\text{Ni}(p, \gamma)^{63}\text{Cu}$ magreakciók esetében. Ezt a gerjesztési függvényt próbálták összehasonlítani a rugalmas proton szórásban talált analóg rezonancia komponensekkel és korrelá-

ciót kerestek a kettő között. Ilyen korreláció nem létezik, mert elvileg nem is létezhet. Az integrális típusú gamma gerjesztési függvényben igen sok rezonancia csúcs jelenik meg, sokkal több, mint az illető bombázó energiatartományban a rugalmas proton szórásban felismert IAR komponens. Az integrális gamma gerjesztési függvény jelzi az összes bonyolult szerkezetű közbensőmag rezonanciát is, amely ebbe a bombázó energiatartományba esik. Így hiába várunk korrelációt a két jelenség csoport között.

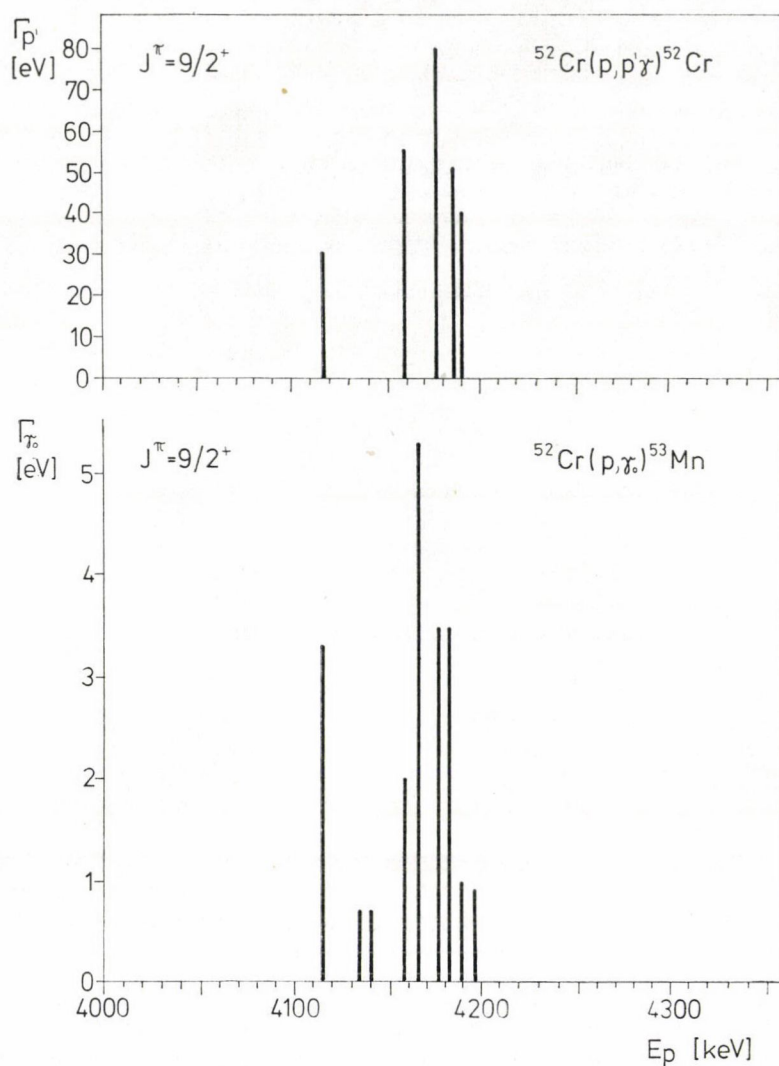
Valódi korrelációt a rugalmas proton szórás és a γ csatorna között akkor remélhetünk, ha a végmagban megtaláltuk azt a kitüntetett egyszerű szerkezetű állapotot, amely az IAR szerkezetével rokon és az erre vezető γ átmenetre vonatkozó differenciális gerjesztési függvényt határozzuk meg. Ez a helyes módszere az IAR komponensek felkutatásának a γ csatornában, ahogyan ezt már tárgyaltuk az előző fejezetekben.

b) Korreláció a rugalmas és a rugalmatlan proton szórási csatornák között

Figyeljük meg a 40. ábrát, amely a 24b és 24c ábrákon látható gerjesztési függvények analiziséből kapott eredményt mutatja. A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$, valamint a $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ magreakciókban meghatározott $g_{0/2}$ IAR komponensek láthatók itt a bombázó proton energiafüggvényében. Ugyanezeket az eredményeket foglaltuk össze az V. és VI. táblázatban.

Az ábráról leolvasható, hogy a rugalmatlan szórásban talált IAR komponensek száma nem egyezik meg a γ csatornában találtakéval, utóbbit úgy tekintve mint a rugalmas csatorna képét, továbbá pozícióik sem egyeznek meg azokkal páronként. Ehhez hasonló eredményt találhatunk az irodalomban több IAR esetben is. (Bilpuch 1976). Meg kell találnunk, hogy mi lehet ennek a jelenségnek a magyarázata. Emlékezzünk vissza most az előző fejezet végén bemutatott erősségfüggvény analízisünkre, és hasonlítsuk össze azokat a Γ_s szétszóródási értékeket, amelyeket erre a két reakciócsatornára kaptunk. A $\Gamma_s(p, \gamma_0) \cong 27$ keV és $\Gamma_s(p, p'\gamma) \cong 15$ keV értékek állnak szemben egymással. Ugyanez történt a $p_{3/2}$ IAR esetében a $^{48}\text{Ti}+p$ rendszerben, ahol a rugalmas szórásban 8,5 keV-et találtak a szétszóródási szélességre, míg a rugalmatlan szórásban 1,5 keV-et (Bilpuch 1976). A doorway állapotok összes létezől elmélete pedig az állapot szétszóródási szélességét $\Gamma^i (\equiv \Gamma_s)$ mint egy csatornától független mennyiséget definiálja. Úgy tűnik viszont, hogy néha az egyes csatornában meghatározott erősségfüggvények eltérőek, és különféle, egymással meg nem egyező információkat adnak a doorway állapotról, jelen esetben az IAR-ról.

Mindezen kérdések megválaszolására meg kell vizsgálnunk az IAR komponensek hullámfüggvényének szerkezetét, és meg kell értenünk, hogy hogyan tükröződik ez a szerkezet a különféle csatornában végzett mérések esetében.



40. ábra. A $g_{9/2}$ IAR komponensek erősségei a rugalmatlan proton szórásban és a gamma csatornában (alapállapotra vezető γ átmenet) a $^{52}\text{Cr} + p$ rendszerben

B) Rezonanciák finomszerkezetének elmélete a kísérleti tapasztalatok tükrében

a) Egyetlen doorway állapot a háttérmentes „c” csatornában

Teljességre való törekedés nélkül vázoljuk a főbb vonásait annak az elméletnek, amelynek keretén belül szeretnénk kifejteni elgondolásainkat az IAR-ek szerkezetére vonatkozóan.

Először tisztáznunk kell a kiindulási feltételeket. Az izobár analóg állapotok leírására a kontinuumba ágyazott héjmodell állapotokat használjuk. Az állapotok hierarchiája a következő:

1. zárt törzs $|C\rangle$ (pl. céltárgy mag, esetleg $J^\pi=0^+$ spin és paritás értékkel),
2. zárt törzsön kívül egy nukleon, $|p_j+C\rangle$ (pl. IAR bemenő csatorna; egy proton + a céltárgy mag, mint törzs),
3. a törzsön kívül elhelyezkedő 2 nukleon és a törzsből kigerjesztett nukleon helyén visszamaradó lyuk (2 részecske — 1 lyuk állapot = az ún. doorway konfiguráció) $p_l + |(n_j n_l^{-1}) \times C\rangle$,
4. a törzsön kívül elhelyezkedő 3 nukleon és ennek megfelelően a törzs 2 lyukkal (3 részecske — 2 lyuk állapotok = az ún. hallway konfiguráció), $p_m p_k + |(n_j n_m^{-1} n_k^{-1}) \times C\rangle$.

Felírásukat nem folytatjuk tovább, de a sorozat hasonlóan folytatható. A két-részecske kölcsönhatás hozza létre egymás után az egyre bonyolultabb konfigurációkat. A fentiekben „p” protont, „n” neutront jelöl, n^{-1} neutron lyukat, l, j, m, k indexek pedig héjmodell pályákat jelölnek.

Kiindulásul tételezzük fel, hogy a tanulmányozni kívánt doorway állapotunk (az IAR) szerkezete olyan, mint az a 37. ábrán látható, tehát egy proton a kontinuumban a zárt törzsön kívül, valamint a törzs analógja és rajta kívül egy neutron (2 részecske — 1 lyuk konfiguráció):

$$\Phi_0 = \varphi^{\text{IAR}} = (2T_0 + 1)^{-1/2} [|p_j C\rangle + (2T_0)^{1/2} |n_j A\rangle], \quad \text{III.2.1}$$

ahol C a törzs és A a törzs analógja a neutron lyuk — proton részecske párral, ebben az esetben $J_C=0$ impulzusmomentummal. Ennek az állapotnak kétféle bomlási lehetősége van, vagy a bemenő csatornába — azaz a kontinuumba — bomlik el, (proton+törzs szeparálva) vagy a közbenső mag bonyolultabb konfigurációjú Φ_i állapotai (pl. a 3 részecske — 2 lyuk szerkezetű hallway állapotokba). Ugyanakkor tegyük fel, hogy ezek a „hallway” állapotok nem tudnak közvetlenül a kontinuumba bomlani. A kontinumban levő proton hullámfüggvényét jelölik χ_E -vel. Feltételezéseinket úgy fejezhetjük ki, mint az alábbi mátrix elemekre tett kikötéseket, ezzel definiálva a modellt:

$$\langle \Phi_0 | H_s | \Phi_0 \rangle = E_a \quad \text{a doorway állapot energiája.}$$

$$\langle \Phi_0 | V_e | \chi_E^c \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Gamma_a^{\dagger 1/2} \quad (\Gamma_a^{\dagger}) \text{ az IAR bomlási szélessége a „c” csatornában.}$$

$$\langle \Phi_0 | V_e | \Phi_i \rangle = M_{0i} \quad i = 1, \dots, N \quad \text{a doorway és hallway állapotok közötti csatolást létesítő kölcsönhatás mátrix eleme (A III. fejezetben } V_{ax}\text{-val jelöltük).}$$

$$\langle \Phi_i | V_e | \chi_E^c \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Gamma_{hi}^{c1/2}$$

Γ_{hi}^c a hallway állapotok bomlási szélessége a „c” csatornában. Ha ez zérus, akkor beszélünk hátérmentes esetről.

$$\langle \Phi_i | H_s | \Phi_j \rangle = \varepsilon_i \delta_{ij} \quad i = 1, \dots, N \quad \text{az } i\text{-edik állapot energiája.}$$

Feltételezzük, hogy csak a szóban forgó „c” csatorna van nyitva, és így a doorway állapot csak itt jelenik meg. Egyetlen Φ_0 doorway állapotunk van, és N darab hallway állapot annak környezetében. H_s az a modell Hamilton operátor, amely egy független részecske Hamilton operátorból (H_0) és az effektív kölcsönhatásból (V_e) épül fel. A doorway állapotot, mint a kontinuumba ágyazott kötött állapotot tekintjük, a Mahaux—Weidenmüller (1968) elképzelésnek megfelelően a magreakciók héjmodell elméletét véve alapul. MacDonald és Mekjian ezt a magreakciók effektív kölcsönhatás elméletével egészítették ki. Felhasználva az S mátrix és a K mátrix közötti összefüggést, a K mátrixot alkalmazták a doorway állapotok finomszerkezetének tárgyalására. (MacDonald and Mekjian 1967)

$$S_{cc} = e^{2i\delta_c} \frac{(1 - i\pi K_{cc})}{(1 + i\pi K_{cc})}, \quad \text{III.2.2}$$

ahol δ_c a fázistolás a centrális potenciálban E energiánál. A K mátrix elemeket úgy írhatjuk fel, mint egy nem rezonáns és egy rezonáns tag összegét. Az elsőt most elhanyagolva, a rezonáns rész:

$$\pi K_{cc}^R(E) = - \frac{\Gamma_a^\dagger(E)/2}{E - E_a - \sum_i \frac{|M_{0i}|^2}{E - \varepsilon_i}} \quad \text{III.2.3}$$

a fenti jelölésekkel.

A H_s Hamilton operátor diagonalizálásából kapott sajátfüggvények a λ állapotok hullámfüggvényei, a doorway és hallway állapotok szuperpozíciójából állnak elő:

$$|\psi_\lambda\rangle = |\Phi_0\rangle \langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle + \sum |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i | \psi_\lambda \rangle \quad \lambda = 1, \dots, N+1. \quad \text{III.2.4}$$

Ezek kielégítik az

$$\langle \psi_\mu | H_s | \psi_\lambda \rangle = E_\mu \delta_{\lambda\mu}$$

egyenleteket. Az E_μ sajátértékeket az

$$E_\mu - E_a = \sum_i \frac{|M_{0i}|^2}{E - \varepsilon_i} \quad \text{III.2.5}$$

sajátérték egyenlet adja.

Ilyen módon a K mátrix a $|\psi_\lambda\rangle$ függvényekkel az alábbi módon fejezhető ki:

$$\pi K_{cc}^R(E) = \frac{1}{2} \Gamma_a^\dagger(E) \sum_{\lambda=1}^{N+1} \frac{|\langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle|^2}{E - E_\lambda}. \quad \text{III.2.6}$$

Ekkor az S mátrix:

$$S_{cc} = e^{2i\delta_c} \frac{1 - \frac{1}{2} i \sum_\lambda \frac{\Gamma_\lambda(E)}{(E - E_\lambda)}}{1 + \frac{1}{2} i \sum_\lambda \frac{\Gamma_\lambda(E)}{(E - E_\lambda)}}. \quad \text{III.2.7}$$

Az E_λ rezonancia energiákhoz tartozó szélességek a

$$\Gamma_\lambda(E) = \Gamma_a^\dagger(E) |\langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle|^2 \quad \text{III.2.8}$$

összefüggést elégítik ki.

Az unitaritásból és az állapotok ortonormáltságából következik, hogy

$$\sum_\lambda |\langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle|^2 = 1 \quad \text{III.2.9}$$

és, ha a Γ_a^\dagger energia függését elhanyagoljuk a vizsgált tartományban, akkor fennáll az összesszabály, amely szerint

$$\sum_\lambda \Gamma_\lambda = \Gamma_a^\dagger(E_a). \quad \text{III.2.10}$$

A Γ_λ szélességeknek az eloszlását mint az E_λ energiák függvényét a

$$|\langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle|^2 = \frac{1}{1 + \sum \frac{|M_{0i}|^2}{(E_\lambda - E_i)^2}} \quad \text{III.2.11}$$

összefüggés segítségével számíthatjuk ki, amelyet a „picket-fence” modell keretein belül tehetünk csak meg, ahogyan azt már tárgyaltuk az erősségfüggvény bevezetésénél a III. fejezetben. Ugyanazokat a feltevéseket használva, mint ott, eredményül a szélességek eloszlására azt kapjuk, hogy

$$\frac{\Gamma_\lambda}{D} = \frac{\Gamma_a^\dagger \Gamma_s / 2\pi}{(E_\lambda - E_a)^2 + \left(\frac{\Gamma_s}{2}\right)^2 + \frac{\Gamma_s D}{2\pi}}, \quad \text{III.2.12}$$

ahol Γ_s a már bevezetett szétszóródási szélesség. Jelen tárgyalásunkban ez az az eloszlásfüggvény, amely számunkra érdekes, mert ennek az analíziséből kapjuk meg az IAR jellemző paramétereit. Az információt inkább ez hordozza, mint az adott csatornában mért reakció hatáskeresztmetszet, amely $\sigma \sim |1 - S_{cc}|^2$ -vel arányos. Meghatározhatjuk mégis az átlagos hatáskeresztmetszetet egy olyan I intervallumra átlagolva, amely nagyobb, mint a hallway állapotok átlagos távolsága, de kisebb, mint a doorway állapot teljes szélessége. Ebben az esetben a finomszerkezetet burkoló görbét mérhetjük meg, és hasonlíthatjuk össze σ kifejezésével. Ez a tárgyalás inkább az $A > 100$ tömegszám tartományban alkalmas, ahol a finomszerkezet nem olyan jól elkülönült komponensekben jelenik meg, mint itt, a közepes tömegszámú magok esetében. A nehéz magoknál — főleg a γ csatornában — a finomszerkezetet burkoló görbét mérjük.

b) Egyetlen doorway állapot a „c” csatornában, ahol a bonyolultabb állapotok is csatolódnak a kontinuumhoz

A már ismertetett formulák kiterjeszthetők arra az esetre is, amikor az izobár analóg állapot közelében elhelyezkedő hallway állapotok is csatolódnak a kontinuumhoz, vagyis saját bomlási szélességgel rendelkeznek. A $\langle \Phi_i | V_c | \chi_E^c \rangle$ mátrix elemek zérustól különböznek. Mivel ez a csatolódás sokkal gyengébb, mint az IAR

és a hallway állapotok közötti csatolás, ezért nevezhetjük ezeket még mindig „hallway” állapotoknak.

Ebben az esetben az E_λ rezonanciákhoz tartozó Γ_λ szélességek a különböző bomlási amplitúdók koherens járulékaiból tevődnek össze:

$$\Gamma_\lambda = 2\pi \left| \langle \Phi_0 | V_e | \chi_E^E \rangle - \sum_{i=1}^N \frac{\langle \Phi_0 | V_e | \Phi_i \rangle \langle \Phi_i | V_e | \chi_E^E \rangle}{E_\lambda - \varepsilon_i} \right|^2 |\langle \Phi_0 | \psi_\lambda \rangle|^2. \quad \text{III.2.13}$$

A kifejezésben szereplő mátrix elemek jelentését már az előző fejezetben tisztáztuk. Ebből az összefüggésből világosan látszik, hogy az egyes Γ_λ szélességek igen változatosan állhatnak elő. A doorway állapot bomlási szélességét modulálja a környezetében levő hallway állapottal való kölcsönhatás, a háttér szélességeken

$\left(\langle \Phi_i | V_e | \chi_E^E \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Gamma_{hi,c}^{1/2} \right)$ keresztül. A $\langle \Phi_0 | V_e | \Phi_i \rangle = M_{0i}$ és a $\langle \Phi_i | V_e | \chi_E^E \rangle$ mátrix elemek értékeinek fluktuációja eredményezhet fluktuációkat a Γ_λ értékekben.

A szélességekre vonatkozó összesszabály ebben az esetben a következőképpen alakul:

$$\Gamma_{ac}^\dagger = \sum (\Gamma_{\lambda c} - \Gamma_{hi,c}). \quad \text{III.2.14}$$

c) Több csatornában megjelenő közös doorway állapot

Eddigi tárgyalásunkban még csak azt követtük nyomon, hogy az IAR hogyan jelenik meg egyetlen „c” csatornában vagyis a K mátrix diagonális elemeit tekintettük. Ha azonban a doorway állapot a „c” csatornán kívül valamely másik „c'” csatornában is megjelenik, akkor ezt a közös doorway állapotot a K mátrix rezonáns részének az off-diagonális elemei írják le

$$K_{cc'}^R = \frac{1}{2\pi} \sum_\lambda \frac{\Gamma_{\lambda c}^{1/2} \Gamma_{\lambda c'}^{1/2}}{E - E_\lambda}, \quad \text{III.2.15}$$

ahol $\Gamma_{\lambda c}$ jelentése ugyanaz, mint az előző pontokban. Így tehát

$$K_{cc'}^R = \frac{\tilde{\Gamma}_{ac}^{\dagger 1/2} \tilde{\Gamma}_{ac'}^{\dagger 1/2}}{E - E_a - \sum_i \frac{M_{0i}^2}{E - \varepsilon_i}} + \sum_i \frac{\Gamma_{hi,c}^{1/2} \Gamma_{hi,c'}^{1/2}}{E - \varepsilon_i}, \quad \text{III.2.16}$$

ahol

$$\tilde{\Gamma}_{ac}^{\dagger 1/2} = \Gamma_{ac}^\dagger + \sum_i \frac{M_{0i}}{E - \varepsilon_i} \Gamma_{hi,c}^{1/2}.$$

Láthatjuk, hogy a háttér állapotok bomlási szélessége $\Gamma_{hi,c}$ és $\Gamma_{hi,c'}$ direkt és indirekt módon is befolyásolják a K mátrix kifejezését.

Ha eltekintünk az M_{0i} a $\Gamma_{hi,c}$ és a $\Gamma_{hi,c'}$ mennyiségek között esetleg fennálló korrelációtól, még akkor is azt várhatjuk, hogy a λ állapotoknak a két különböző

csatornában talált bomlási amplitúdói korreláltak lesznek (Mekjian—MacDonald 1968):

$$\left\langle \frac{\Gamma_{\lambda c}^{1/2} \Gamma_{\lambda c'}^{1/2}}{D_\lambda} \right\rangle = \frac{\frac{1}{2} \Gamma_s \Gamma_{ac}^{1/2} \Gamma_{ac'}^{1/2}}{(E - E_a)^2 + \left(\frac{1}{2} \Gamma_s \right)^2}, \quad \text{III.2.17}$$

ahol Γ_s a szétszóródási szélesség a fentiekben már definiált módon

$$\Gamma_s = 2\pi \left\langle \frac{M_{0i}^2}{D_i} \right\rangle \quad \text{III.2.18}$$

és D_λ valamint D_i a finomszerkezet, illetve háttér állapotok átlagos távolsága.

Ez a korreláció abból származik, hogy az IAR-nek az adott „c”, illetve „c'” csatornára vonatkozó bomlási szélessége oszlik el az ott jelenlevő bonyolultabb állapotokra. Ez hozzá létre a mindkét csatornában megjelenő finomszerkezetet.

Az összefüggések alapján elvárjuk a két csatorna közötti korrelációt. Az előzőekben említett kísérleti tapasztalataink azonban ellene mondanak annak, hogy ez a korreláció a finomszerkezet minden egyes λ komponensére fennáll. Nem található „egy az egy” megfelelés a „c” és „c'” csatornák között akár rugalmas és rugalmatlan proton szórást, akár rugalmatlan szórást és γ csatornát hasonlítunk össze.

A csatornák közötti különbségek magyarázatát az egyes λ komponensek szerkezetében rejlő különbségek adhatják. Láttuk, hogy az adott „c” csatornában megjelenő $\Gamma_{\lambda c}$ bomlási szélességek milyen bonyolult módon (III.2.13) függenek a csatolási mátrix elemektől, és a csatornában a doorway állapotok nélkül jelenlevő háttér-szélességektől. Ezek együttesen határozzák meg λ -dik komponens erősségét az illető „c” csatornában. A komponensek erősségeinek egymáshoz viszonyított arányai azonban megváltozhatnak, ha a „c” csatornáról áttérünk a „c'” csatornára. Lehet, hogy $\Gamma_{\lambda c} \gg \Gamma_{\lambda c'}$ vagy esetleg egy másik komponens esetében $\Gamma_{\lambda c} \ll \Gamma_{\lambda c'}$. Ez a különbség olyan nagy is lehet, hogy egy komponens erőssége a „c” csatornában mérhető, de a „c'” csatornában már olyan gyenge, hogy a kísérletileg elérhető érzékenységi határ alá esik, és így nem észlelhetjük. Így állhat elő az az eredmény, amelyet sok esetben találtunk mi és mások is, hogy két olyan csatorna között sem volt teljes a korreláció, ahol az IAR megjelent mint közös doorway állapot, és ezt elvárhattuk volna (Fodor 1980).

d) Erősségfüggvény a különböző csatornában

A „c” csatornában meghatározott erősségfüggvény, amely a doorway állapot komponenseinek eloszlását írja le, különbözhet a „c'” csatornában meghatározott erősségfüggvénytől, és szélességük is eltérőnek adódhat. Ezt az ellentmondást azzal a javaslattal lehet feloldani, hogy minden csatornára külön határozzuk meg az erősségfüggvényt, vagy fogadjuk el a bemenő csatornára vonatkozó, azaz a rugalmas protonszórásban talált erősségfüggvényt. Ennek alapján határozzuk meg a szétszóródási szélességet minden csatornára külön, tüntessük ki a rugalmas protonszórásban talált értéket.

Az irodalomban javaslatot tettek (*Lane et al* 1978) egy ún. „off-diagonális erősségfüggvény” definiálására. Ez az erősségfüggvény nem a $\gamma_{\lambda c}^2$ redukált szélességek eloszlását adja meg, hanem a $\gamma_{\lambda c}\gamma_{\lambda c'}$ szorzatokból épül fel, tehát előjele van. Ennek meghatározására a kísérletek analízisének a $\gamma_{\lambda c}$ és $\gamma_{\lambda c'}$ amplitúdókat relatív fázisokkal együtt kell meghatároznunk, hogy ezek ismeretében az off-diagonális erősségfüggvényt megkapjuk. A $\gamma_{\lambda c}$ és $\gamma_{\lambda c'}$ mennyiségek relatív fázisait azonban csak akkor lehet meghatározni (*Dittrich et al* 1975 és 1977), ha a „c” és „c'” csatornában azonos típusú részecskék vannak, azonos energiával. Az irodalomban tárgyalt eset a $^{40}\text{Ca}(p, p')$ reakcióban talált $p_{3/2}$ IAR volt, ahol a két csatorna a két különböző csatorna spin értékkel ($s=3/2$ és $s=5/2$) végbemenő rugalmatlan protonszórást jelentette. Ez a módszer azonban nem alkalmas a rugalmas szórásnak a rugalmatlan szórással, illetve a γ csatornával való összehasonlítására.

e) A szétszóródási szélesség

A doorway állapot szétszóródási szélességét Γ_s -t, mint csatorna független mennyiséget vezették be az elméletbe. Láttuk, hogy ez igen fontos jellemzője az IAR-nek is. Ez méri annak a kölcsönhatásnak erősségét, amely az egyszerű szerkezetű doorway állapotot (pl. IAR-t) a bonyolultabb konfigurációjú háttér állapotokkal összekeveri. Eddigi modellünkben tehát Γ_s a doorway és hallway állapotok közti csatolást létesítő kölcsönhatás mátrix elemével arányos (lásd a III.2.18 formulát). A doorway állapot szétszóródását vagyis elkeveredését a háttér állapotokra kétféle fizikai folyamat okozhatja, és ennek megfelelően két komponensű szerkezete van. Az analóg ($T>$) állapotoknak a környező $T<$ izospinű állapotokkal történő elkeveredését a céltárgy + proton rendszerben ható Coulomb kölcsönhatás okozza. Ez kétféle módon fejt ki hatását. 1. Létrehozhat egy ún. belső keveredést, amely azt jelenti, hogy a két-részecske kölcsönhatás direkt módon összekeveri a megfelelő konfigurációjú $T>$ és $T<$ állapotokat. Ezt a keveredést a $\langle \Phi_0 | V | \Phi_{T<} \rangle \langle \Phi_{T<} | V | \Phi_i \rangle$ mátrix elemek jellemzik. 2. Ezenkívül létrejöhet az ún. külső keveredés, amely a mag Coulomb terének a bejövő proton hullámfüggvényére kifejtett hatásán alapul. A proton hullámfüggvényét annyira eltorzítja a magon kívül a Coulomb tér, hogy ez izospin keveredéshez vezet. Ez mindazokat az állapotokat érinti, amelyek a proton kontinuumhoz csatolódnak, tehát az állapotok keveredése a kontinuumon keresztül megy végbe. Ilyenkor a keveredést a $\langle \Phi_0 | V | \chi_E^c \rangle \langle \chi_E^c | V | \Phi_i \rangle$ mátrix elemek írják le. A Γ_s szerkezete ennek megfelelően alakul:

$$\Gamma_s = \Gamma_{\text{belső}}^{\dagger} + \Gamma_{\text{külső}}^{\dagger} \quad \text{III.2.19}$$

Előfordult, hogy bizonyos tömegszám tartományokban ezek közül az egyik vagy másik típusú keveredés elhanyagolhatóan bizonyult. Általában mindkettő szerepet játszik, és együtt kapjuk meg Γ_s meghatározásával, a kísérletekből. A kétféle típusú keveredés csak elméletileg választható szét (lásd pl. Mahaux—Weidenmüller 1969).

Méréseink analízisének a probléma nem abból adódik, hogy $\Gamma_{\text{belső}}^{\dagger}$ és $\Gamma_{\text{külső}}^{\dagger}$ nem határozható meg elkülönítve, hanem, hogy Γ_s értéke némelykor csatornánként más és más. Ebből következően a belőle származtatott csatolási mátrixelem értéke is más.

A $^{52}\text{Cr}(p, \gamma)^{53}\text{Mn}$ reakcióban talált $g_{9/2}$ IAR komponensek erősségfüggvényéből $\Gamma_s \cong 27$ keV és a $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióból ugyanennek az IAR-nek a jellemzésére $\Gamma_s = 15$ keV adódott. Az előzőből $M_{0i} = 6,4$ keV értéket kaptunk (a III. fejezetben ezt V_{ha} jelölte), míg az utóbbi Γ_s érték alapján $M_{0i} = 4,9$ keV adódna. Nem tekinthetjük ezt mérési hibának. A Γ_s és M_{0i} mennyiségek közötti összefüggésben szereplő D_i paraméter a finomszerkezeti állapotoknak az átlagos távolsága. Az $M_{0i} = 6,4$ keV és $M_{0i} = 4,9$ keV értékek származtatásánál egységesen $D_i \cong 12$ keV értéket tételeztünk fel. Ez a (p, γ) reakcióban a komponensek számából is igazoltnak látszik, mert 9 komponens oszlik el kb. 100 keV-es energiatartományban. A 40. ábráról azonban kitűnik, hogy a rugalmatlan protonszórás esetében csak 5 komponens található ugyanebben a tartományban. Ennek oka — mint mondtuk — a finomszerkezeti állapotok szerkezetében kereshető. Ha a rugalmatlan csatornában meghatározott erősségfüggvényt kevesebb számú állapot határozta meg, jogos-e itt is a $D_i \sim 12$ keV átlagos távolsággal számolni? D_i -t megnövelve a komponensek számának arányában (9/5) és ezzel számítva ki $\Gamma_s = 15$ keV esetén az M_{0i} értéket, $M_{0i} = 6,6$ keV adódik. Az átlagos nivótávolságok korrekciójával a csatornák között így egyezést érhetünk el.

Ezzel — úgy tűnik — eljutottunk egy teljesebb képhez az IAR-ek finomszerkezetére vonatkozóan. A keveredést okozó vagyis a finomszerkezetet létrehozó kölcsönhatás valóban független bármely reakció csatornától. A finomszerkezet megjelenése az állapotok konfigurációjától függően más lehet az egyes csatornában. Korreláció van azon csatornák között, amelyekre nézve az IAR közös doorway állapot, azonban a mérésekben látható komponensek számban és intenzitás arányban csatornánként különbözhetnek. Ekkor pedig a különböző csatornában meghatározott erősségfüggvények is eltérőek lehetnek. Ebben az esetben D_i már csatornafüggőnek tekinthető, és nem azoknak a fiktív állapotoknak a számát méri, amelyeknek a doorway állapothoz köze van, hanem azon állapotok számától függ, amelyek olyan szerkezetűek, hogy az adott csatornában megjelennek. A mérés érzékenységétől és felbontó képességétől függ, hogy mekkora az a legkisebb bomlási szélesség, amelyet abban a csatornában még észreveszünk. Ha nem létezne az alsó határ, akkor talán minden csatornában azonos számú komponens észlelhetnének.

IV. fejezet

ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban bemutatott kísérleti és elméleti eredményeket az alábbiakban összegezhetjük:

1. Bevezettük a differenciális típusú γ -gerjesztési függvények alkalmazását abból a célból, hogy (p, γ) reakciókban is megtalálhassuk a komponensekre felhasadt izobár analóg rezonanciákat. Ez a módszer a közepesen nehéz magok esetében általánosan javasolható, különösen azokban a gerjesztési tartományokban, ahol az IAR-ek megjelennek, mert itt az átlagos nivótávolság értékek kedveznek a finomszerkezet kialakulásának, ugyanakkor megnehezítik az analóg rezonancia komponenseinek felismerését a környezetben jelenlevő egyéb rezonanciák miatt.

2. A $g_{9/2}$ héjmodell pályán elhelyezkedő proton konfigurációval kialakított izobár analóg rezonanciák kísérleti vizsgálata három különböző céltárgymag esetében történt meg.

⁶³Cu céltárgymag:

- A ⁶³Cu(*p*, γ)⁶⁴Zn magreakció gerjesztési függvényében megtaláltuk a $g_{9/2}$ IAR-t két komponensre felhasadva: $E_p = 3217$ keV és 3251 keV bombázó proton energiáknál.
- Szögeloszlás aszimmetria vizsgálatok alátámasztották a $J^\pi = 3^-$ spin és paritás értéket mindkét rezonancia esetében.
- Az IAR komponensek gerjesztési energiáiból leszármaztatható a ⁶⁴Cu—⁶⁴Zn magokra vonatkozó Coulomb energia különbség, amely $\Delta E_c = 9,523 \pm 0,010$ MeV-nek adódott.
- Meghatároztuk a két $J^\pi = 3^-$ rezonancia γ bomlásának elágazási arányait.
- Meghatároztuk a ⁶⁴Zn magban talált γ átmenetek Γ_γ abszolút átmeneti valószínűségeit.
- A ⁶⁴Zn magban eddig kollektív gerjesztésként ismert antianalóg állapotra ($J^\pi = 3^-$, $T <$) vezető γ átmeneti valószínűségek értékéből meghatároztuk az antianalóg állapot hullámfüggvényében az egyszerű szerkezetű és a kollektív komponens amplitúdóját.

$$\psi_{T<}^3 = a\varphi_{sp}^{AA} + b\varphi_{koll}$$

szerkezet feltételezéssel; $a^2 = 0,12$ és $b^2 = 0,88$ értékeket kaptunk.

- A ⁶⁴Zn magban található $g_{9/2}$ IAR-t kimutattuk a ⁶⁰Ni(α , p_0)⁶³Cu magreakció gerjesztési függvényében is.

⁵⁶Fe céltárgymag:

- A ⁵⁶Fe(*p*, γ)⁵⁷Co magreakció gerjesztési függvényében $E_p = 3728$ keV és 3735 keV bombázó energiáknál találtuk meg a $g_{9/2}$ IAR két komponensét.
- Szögeloszlás vizsgálatokkal bebizonyítottuk, hogy a ⁵⁷Co magban talált rezonanciák $J^\pi = 9/2$ spin értékkel rendelkeznek. A pozitív paritás hozzárendelés héjmodell megfontolások alapján alátámasztható.
- $E_x = 4,585$ MeV gerjesztési energiánál megtaláltuk a $g_{9/2}$ antianalóg állapotot a ⁵⁷Co magban, amelyet a két $J^\pi = 9/2^+$ rezonancia γ bomlása is kitüntet. Szögeloszlás méréssel kimutattuk, hogy $J^\pi = 9/2$ spin érték jellemzi ezt az állapotot. Pozitív paritás értékét a γ átmeneti valószínűségek is alátámasztják. Az IAR komponensek és antianalóg állapot közötti izovektor M1 γ átmenetek jelennek itt meg.
- Meghatároztuk a ⁵⁷Co magban talált izobár analóg rezonanciák γ bomlásának elágazási arányait.
- Meghatároztuk a ⁵⁷Co magban talált $g_{9/2}$ izobár analóg rezonancia komponensekre vonatkozó abszolút gamma átmeneti valószínűségeket.
- Meghatároztuk a ⁵⁷Co magban az átlagos nivótávolságot $E_x = 9,7$ MeV gerjesztési energiánál. Ez $D \cong 3$ keV-nek adódott.

⁵²Cr céltárgymag:

- A ⁵²Cr(*p*, γ)⁵³Mn magreakció gerjesztési függvénye alapján 9 komponensre felhasadva találtuk meg a $g_{9/2}$ izobár analóg rezonanciát $E_p = 4115$, 4134 , 4140 , 4157 , 4165 , 4176 , 4182 , 4188 és 4197 keV bombázó energiáknál.
- A $g_{9/2}$ IAR komponensek spin és paritás értékeinek meghatározására a ⁵³Mn magban, a már említett módszer szolgált. Szögeloszlás mérések analízise, és elvi megfontolások alátámasztják a $J^\pi = 9/2^+$ spin és paritás hozzárendelést minden esetben.

- Meghatároztuk az IAR komponensek gamma bomlásra vonatkozó elágazási arányait, és megállapítottuk, hogy az IAR-t jellemző legfontosabb γ átmenet a ^{53}Mn mag alapállapotára vezető E1 γ átmenet.
 - Meghatároztuk a Γ_γ abszolút átmeneti valószínűségeket a ^{53}Mn magban.
 - Meghatároztuk a ^{53}Mn magban az átlagos nivótávolságot $E_x \cong 10,5$ MeV gerjesztési energiánál. Ez $D \cong 1$ keV-nek adódott.
 - Elméleti analízisnek vetettük alá az alapállapotra vezető E1 γ átmenetre vonatkozó abszolút átmeneti valószínűség értékek (Γ_{γ_0}) energia szerinti eloszlását, és ebből meghatároztuk az erősségfüggvényt, $\left\langle \frac{\Gamma_\gamma}{D_1} \right\rangle$. Az irodalomban először történt meg, hogy az IAR paramétereit a gamma csatornában mért eloszlásból származtatjuk.
 - Az erősségfüggvényből meghatároztuk a $g_{9/2}$ IAR szétszóródási szélességét a ^{53}Mn magban, és ez $\Gamma_s = 27$ keV-nek, valamint az állapotok keveredését létrehozó Coulomb kölcsönhatás mátrix elemét, amely 6,4 keV-nek adódott.
 - Megtaláltuk a $g_{9/2}$ IAR komponenseit a $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ magreakcióban is. Megállapítottuk, hogy a megtalált komponensek száma a kétféle reakció csatornában eltérő.
 - A rugalmatlan protonszórásban $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{53}$ mért bomlási szélességek összegéből $\Sigma \Gamma_{p'} = 218$ eV-t kaptunk, amely a más típusú mérésből ($^3\text{He}, dp$) reakcióból meghatározott $\Gamma_{p'}^{2+} = 230$ eV-al jó egyezésben van.
 - A $\Sigma \Gamma_{\gamma_0}$ abszolút átmeneti valószínűség értéket felhasználtuk arra, hogy az analóg rezonancia egyszerű szerkezetű és kollektív gerjesztett törzs komponenseinek arányát meghatározzuk. Ebből a becslésből $\psi_{g_{9/2}}^{\text{IAR}} = a \cdot \varphi_{sp}^{\text{IAR}} + b \cdot \varphi_{\text{gerj. 2}}^{\text{IAR}}$ szerkezetet tételezve fel az IAR hullámfüggvényére $a^2 = 0,53$ és $b^2 = 0,47$ adódik. Az itt talált amplitúdók aránya megegyezik a $^3\text{He}, dp$ reakcióban (Galès 1976) talált $\Gamma_{p_0} = 320$ eV és $\Gamma_{p'}^{2+} = 230$ eV arányával.
 - Az erősségfüggvény analízist elvégeztük a rugalmatlan proton szórási csatornára is; a $^{52}\text{Cr}(p, p'\gamma)^{52}\text{Cr}$ reakcióból kapott $\gamma_{p'}^2$ értékek alapján.
3. A meglevő elméletek és kísérleti tapasztalatok alapján rámutattunk arra, hogy az izobár analóg rezonanciák esetében milyen típusú korreláció várható az egyes csatornák között. Kimutattuk, hogy az irodalomban több esetben helytelenül vizsgálták a rugalmas protonszórás és a teljes integrális γ csatorna közötti korrelációt.
4. Rámutattunk a gamma csatornában a kitüntetett, speciális végállapotok fontosságára (antianalóg állapot, vagy egyszerű törzs+egy nukleon: pl. alapállapot).
5. Javaslatot tettünk annak az ellentmondásnak a feloldására, amely a különböző csatornáknak meghatározott erősségfüggvényekből származik.
6. Javaslatot tettünk arra, hogy a nivósűrűség értékek módosításával hogyan érhetünk el csatorna független szétszóródási szélességet.

V. fejezet

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönettel tartozom *Szentpéteri Imre*, *Kardon Béla* és *Sziklai János* kollégáimnak, akikkel a méréseket közösen végeztük.

A KFKI Gyorsítóberendezések Osztályának, *Klopper Ervinnek* és *Kostka Pálnak* és az üzemeltetőknek, itt szeretném megköszönni áldozatkész munkájukat, amellyel lehetővé tették, hogy az EG—2 generátor olyan minőségű üzemórákat teljesített, hogy a szükséges precíz méréseket elvégezhattük.

Köszönettel tartozom az ELTE Atomfizikai Tanszék munkatársának *Deák Ferencnek*, aki a spektrumkiértékelő és a legkisebb négyzetek módszerével illesztő, TPA-ra megírt programokat rendelkezésünkre bocsájtotta.

Ugyancsak köszönettel tartozom a Magfizikai Főosztály laboránsainak *Bódi Tibornénak*, *Dézsai Istvánnénak*, *Klopper Ervinnénak*, *Majoros Katalinnak*, *Majthényi Rózsának*, *Meszer Erikának*, *Pelle Ágnesnek* és *Simon Tibornénak*, akik nélkül a hosszútávú 2—3 hetes mérések megvalósíthatatlanok lettek volna.

Végül köszönetet mondok *Bódi Tibornénak*, a dolgozat gépeléséért.

IRODALOM

- Anderson J. D.* and *Wong C.* Phys. Rev. Lett. 7, 250, 1961.
Arai E., *Ogawa M.* and *Sato H.*, Nucl. Phys. A256, 127, 1976.
Bernstein A. M. Advances in Nuclear Physics Vol. 3. edited by *M. Baranger* and *E. Vogt*, Plenum Press, New York—London, 325, 1969.
Bilpuch E. G., *Lane A. M.*, *Mitchell G. E.* and *Moses J. D.*, Phys. Lett. C28, 145, 1976.
Bohr A. and *Mottelsohn B.*, Nuclear Structure, Vol. I. *W. A. Benjamin*, Inc. London 1969.
Demeter I., *Dóra L.*, *Keszthelyi L.*, *Pócs L.*, *Szentpéteri I.* and *Zimányi J.*, Acta Physica Hung. 25, 403, 1968.
De Toledo Piza A. F. R., *Kerman A. K.*, *Fallieros S.* and *Venter R. H.*, Nucl. Phys. 89, 369, 1966.
Di Toro M., Nucl. Phys. A155, 385, 1970.
Dittrich T. R., *Gould C. R.*, *Mitchell G. E.*, *Bilpuch E. G.* and *Stelzer K.*, Phys. Lett. 59B, 230, 1975.
Dittrich T. R., *Gould C. R.*, *Mitchell G. E.*, *Bilpuch E. G.* and *Stelzer K.*, Nucl. Phys. A229, 430, 1977.
Dubois J., Nucl. Phys. 23, 537, 1961.
Ejiri H., *Patrick Richard*, *Ferguson S.*, *Heffner R.* and *Perry D.*, Nucl. Phys. A128, 388, 1969.
El Kateb S. and *Griffiths G. M.*, Nucl. Phys. A240, 120, 1975.
Endt P. M., Charged Particle Induced Radiative Capture, Proc. of a Panel, Vienna 1972. p. 3., 1974.
Engelbertink G., *Lindeman A. P.* and *Jacobs M. J. N.*, Nucl. Phys. A107, 305, 1968.
Feshbach H., *Kerman A. K.* and *Lemmer R. M.*, Ann. Phys. 41, 230, 1967.
Feshbach H., Clustering Aspects of Nuclear Structure and Nuclear Reactions (Winnipeg) Editors: *W. T. H. Van Oers*, *J. P. Svenne*, *J. S. C. McKee*, *W. R. Falk*, American Institute of Physics, New York 1978.
Fodor Ilona, *Demeter I.*, *Keszthelyi L.*, *Szentpéteri I.*, *Szőkefalvi-Nagy Z.*, *Szücs J.*, *Varga I.* and *Zimányi J.*, Nucl. Phys. A116, 167, 1968.
Fodor I., *Szentpéteri I.* and *Szücs J.*, Phys. Lett. 32B, 689, 1970.
Fodor I., Kandidátusi Értekezés, 1972. Magyar Fiz. Foly. XX., 5. füzet., 1972.
Fodor I., Conference on Correlations of Nuclei, Balatonfüred 1973. Edited by *J. Németh*, 307. old., 1973.
Fodor I., Charged Particle Induced Radiative Capture, Proceedings of a Panel, Vienna IAEA, 1974.
Fodor I., *Sziklai J.*, *Beckert K.*, *Herrmann F.* and *Schobbert H.*, Physics of Medium-light Nuclei, Florence 1977. Contributions p. 78., 1977.
Fodor I., *Sziklai J.*, *Kardon B.*, *Rama Rao J.*, *Beckert K.*, *Herrmann F.* and *Schobbert H.*, Journ. Phys. G.: Nucl. Phys. 4, 1117, 1978.
Fodor I., *Sziklai J.*, *Kleinwächter P.*, *Schobbert H.* and *Herrmann F.*, Journ. Phys. G.: Nucl. Phys. 5, 1267, 1979.
Fodor I. and *Sziklai J.*, Phys. Rev. C21, 787, 1980.
Fodor I., *Szentpéteri I.*, *Schmiedekamp A.*, *Beckert K.*, *Gersch H. U.*, *Delaunay J.*, *Delaunay B.* and *Ballini R.*, Journ. Phys. G.: Nucl. Phys., 2, 365, 1976.

- Ford J. L. C., Marsh V. L., Robinson R. L. and Moak C. D., Nucl. Phys., *A103*, 525, 1967.
 Fox J. D., Moore C. F. and Robson D., Phys. Rev. Lett. *12*, 198, 1964.
 Gales S., Fortier S., Laurent H., Maison J. M. and Schapira J. P., Phys. Rev. *C14*, 842, 1976.
 Hamida Banu and Sen Gupta M. M., Nucl. Phys., *A307*, 106, 1978.
 Hanna S. S., Isospin in Nuclear Physics, Edited by D. H. Wilkinson, North-Holland Publ. Co. Amsterdam. p. 591, 1969.
 Kerman A. K. and De Toledo Piza A. F. R., Ann. Phys. *48*, 173, 1968.
 Keyworth G. A., Kyker G. C., Bilpuch E. G. and Newson H. W., Nucl. Phys. *89*, 590, 1966.
 Klapdor H. V., Schrader M., Bergdolt G. and Bergdolt A. M., Nucl. Phys. *A245*, 133, 1975.
 Kocher D. C. and Haeberli W., Nucl. Phys., *A196*, 225, 1972.
 Lane A. M., Thomas R. G. and Wigner E. P., Phys. Rev. *98*, 693, 1955.
 Lane A. M., Isospin in Nuclear Physics, Edited by D. H. Wilkinson, North-Holland Publish. Co. Amsterdam. p. 509, 1969.
 Lane A. M., Lynn J. E. and Moses J. D., Nucl. Phys. *A232*, 189, 1974.
 Lane A. M., Ditttrich T. R., Mitchell G. E. and Bilpuch E. G., Phys. Rev. Lett., *41*, 454, 1978.
 Lindström D. P., Newson H. W., Bilpuch E. G. and Mitchell G. E., Nucl. Phys., *A168*, 37, 1971.
 MacDonald W. and Mekjian A. Z., Phys. Rev. *160*, 730, 1967.
 MacDonald W., Phys. Rev. Lett. *40*, 1066, 1978.
 MacDonald W., Phys. Rev. *C20*, 126, 1979.
 Mahaux C. and Weidenmüller H. A., Nucl. Phys. *A91*, 241, 1967.
 Mahaux C. and Weidenmüller H. A., Shell Model Approach to Nuclear Reactions, North-Holland Publish. Co., Amsterdam, 1969.
 Maripuu S., Phys. Lett. *31B*, 181, 1970.
 Mekjian A. and MacDonald W., Phys. Rev. Lett. *18*, 706, 1967.
 Mekjian A. Z. and MacDonald W., Nucl. Phys. *A121*, 385, 1968.
 Mitchell G. E., Statistical Properties of Nuclei, Edited by J. B. Garg, Plenum Press, New York—London, p. 299, 1972.
 Park Y. S. and Daenick W. W., Phys. Rev. *180*, 1082, 1969.
 Peters W. C., Bilpuch E. G. and Mitchell G. E., Phys. Lett., *42B*, 422, 1972.
 Rangacharyulu C., Szöghy I. M., St-Pierre C. and Ramavataram K., Phys. Rev. *C19*, 1762, 1979.
 Schrader M., Klapdor H. V., Bergdolt G. and Bergdolt A. M., Phys. Lett. *60B*, 39, 1975.
 Scharp W. T., Kennedy J. M., Sears B. J. and Hoyle M. G., Atomic Energy of Canada Lt. Chalk River Project, 1954.
 Snover K. A., Amann, J. F., Hering W. and Paul P., Phys. Lett. *37B*, 29, 1971.
 Veje C. J., Kong. Danske Vidensk. Selsk. Mat-Fys. Meddr. *35*, No 14, 1966.
 Warburton E. K. and Weneser J., Isospin in Nuclear Physics, Edited by D. H. Wilkinson, North-Holland Publish. Co. Amsterdam. p. 173, 1969.
 Watson D. D., Marthuruthil J. C. and Lee F. D., Phys. Rev. *164*, 1399, 1967.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1983. ápr. 27. — Terjedelem: 9,10 (A/5 ív)
84-1963 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

Ára: 15 Ft
Előfizetés kötetenként: 90 Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Sailer Kornél, Németh Judit és Lovas István: Pion-kondenzált normál állapotú, anizotrop anyag fázisegyensúlya</i>	1
<i>Fodor Ilona: Az izobár analóg állapotok finomszerkezete</i>	29

307 226
MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

MAGASABB RENDŰ SUGÁRZÁSI KORREKCIÓK SZÁMOLÁSA HYPERONOK β -BOMLÁSÁHOZ A GLASHOW—WEINBERG—SALAM ELMÉLETBEN

MARGARITISZ TANASZISZ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	105
2. Weinberg—Salam elmélet	109
2.1. Lagrange függvény	110
2.2. Mérték rögzítés. Ghostok	111
3. Renormálás	112
3.1. A kontratagok meggyártása a mértékbozon szektorban	113
3.2. Mértékbozon — fermion kölcsönhatási szektor	115
3.3. A töltés renormálása	119
4. μ -bomlás egy loop rendben	123
5. β -bomlás	130
5.1. Gyenge korrekciók	131
5.2. Elektromágneses korrekciók	133
A. Virtuális foton korrekciók	136
B. Bremsstrahlung korrekciók	139
C. Soft foton határeset	142
6. Numerikus kiértékelés és eredmények	144
Irodalomjegyzék	149

Függelék:

A) Lagrange függvény. Gráfszabályok	149
B) Skalár egy-loop integrálok	153
C) Fermion sajátenergiás járulékok. Hullámfüggvény renormálás	157
D) Fermion-foton vertexkorrekciók	162
E) $A-W^0$ mixing és a foton sajátenergiás gráfok járulécai	165
F) Spinorok, Gamma-mátrixok	168
G) D -függvények a box gráfhoz	168

I. BEVEZETÉS

Egyre több kísérleti tény mutatja, hogy az $SU(2)_L \times U(1)$ elmélet, amelyet Weinberg és Salam javasolt [1], helyesen írja le a gyenge és elektromágneses kölcsönhatásokat. Ez az első lépcsők a kölcsönhatások egyesített elméletének leírásához.

Természetesen az elméleti és kísérleti eredmények összehasonlítása leginkább a gráf szinten történt. Néhány esetben azonban szükség volt magasabb rendű számolásokra, így az univerzalitás vizsgálatánál, tiltott bomlásoknál, $K_L - K_s$ tömegkülönbség számolásánál, P és CP sértés tanulmányozásánál. Ezekben a folyamatokban

* Érkezett 1981. dec. 8. Egyetemi doktori disszertáció.

mindig jelen van a QCD , amely elbonyolítja a számolásokat. Az utóbbi időkben jelentős lépéseket tettek tiszta leptonikus folyamatok egy loop korrekcióinak a számolására [2, 3, 4, 5, 6], amelyek lényegesen lehetnek a közeljövőben nagyobb gyorsító energiáknál.

Ezzel párhuzamosan *A. Sirlin* [7] kidolgozott egy olyan elméletet, amely lehetővé teszi a magasabb rendű korrekciók számolását olyan folyamatokra is, ahol jelen van az erős kölcsönhatás is (semleges vagy töltött áramok mélyen rugalmatlan szórában [8, 9] β -bomlás [7]). Az utóbbi esetet csak az univerzalitás szempontjából vizsgálta, tehát igen speciális esetben.

Számolásait az áramalgebra és az operátor szorzat kifejtés (OPE) segítségével végezte el.

Az $SU(2)XU(1)$ elmélet döntő jelentősége az, hogy renormálható. Ez a tulajdonság lehetővé teszi, hogy magasabb rendű korrekciókat számoljunk, ezzel alkalom nyílik az elmélet tesztelésére fa gráf szinten túl is. Ez egyre fontosabbá válik a kísérleti fizikusok szempontjából is. A fizikai paraméterek véges járulékokat kapnak, például a vektorbozon tömegek eltolódnak [10, 11], amely lényeges lehet a keresésük szempontjából. A másik igen fontos kérdés a Weinberg szög pontos meghatározása, vagyis a korrekciók leválasztása. Ez igen lényeges a nagy egyesített elméletek szempontjából, mert ez lehetőséget ad az elméletek tesztelésére. A Weinberg szög szoros kapcsolatban van a proton élettartamával is. Az utóbbi időben ilyen irányban is nagy erőfeszítéseket tettek a fizikusok [12, 8, 9].

Az ilyen jellegű számolások körét bővíti ki a jelen dolgozat, amelyben hyperonok β -bomlásához vannak kiszámítva az egy loop korrekciók az $SU(2)XU(1)$ elméletben. Korábban már történtek ilyen jellegű számolások a kvantum-elektrodinamika keretén belül [13, 14, 15, 16], tehát csak foton korrekciókat vizsgálva a $V-A$ elméletben. A $V-A$ elmélet nem renormálható, így szükség volt egy önkényes cut-off paraméter bevezetésére. Látni fogjuk, hogy az $SU(2)XU(1)$ elméletben ezt a szerepet éppen a vektorbozon tömege fogja átvenni.

Nemrég mérték meg a CERN-ben több hyperon β -bomlását.

$$(\Sigma^- \rightarrow n e \bar{\nu}; \Sigma^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}; \Lambda^0 \rightarrow p e \bar{\nu}; \Xi^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}; \Xi^- \rightarrow \Sigma^0 e \bar{\nu}).$$

A hyperon nyalábot az SPS-el (super proton synchrotron) állították elő. 200 és 210 GeV/c energiájú protonokat ütköztettek nucleon tarrgettel. A keletkezett töltött hyperonok energiája 70–140 GeV/c energia tartományba esett. A nyalábot ütközés után több mágnesből álló csatornán vezették keresztül, hogy a keletkezett részecskéket polaritás és impulzus szerint szelektálják. A mágneses csatorna végére DISC Čerenkov számlálót helyeztek a részecskék azonosítására. A hyperonok bomlásának rekonstrukciója spektrométer és drift kamrák segítségével történik.

Az előállított hyperon nyaláb fluxusa egy-két nagyságrenddel nagyobb volt, mint ahogy az korábban alacsony energián történt. Emiatt a bomlási statisztika is igen megnőtt. (Folyamatonként több ezer eseményt kaptak.) A pontos mérés szükségessé tette a sugárzási korrekciók figyelembevételét a kiértékelésnél. A kísérleti fizikusok Dalitz eloszlásokat vettek fel (az elektron és a keletkezett hadron energiája szerint). Néhány folyamat esetében polarizált mérésekkel is rendelkeztek. Ezen eloszlások fitteléséből határozzák meg a gyenge formfaktorokat. Eddig nem történtek olyan jellegű számolások, amelyeket felhasználhattak volna a kísérleti fizikusok ezen mérések kiértékelésére. Mi olyan formában adjuk meg a sugárzási korrekciókat,

hogy közvetlenül alkalmazhatók legyenek. Nem szorítkozunk csak néhány formfaktor jelenlétére, ezenkívül kiszámítjuk a hard foton bransstrahlungot is, mivel a mérés során a végállapotban jelenlevő fotonok nincsenek kimérve.

A kísérleti fizikusok a gyenge formfaktorok meghatározása után egy szokásos „Cabibbo”-fittel a θ , F , D paramétereket is megkapják. Tekintsük át, milyen megszorításokat kapunk a hat f_1 , f_2 , f_3 , g_1 , g_2 , g_3 gyenge formfaktorra, ha felhasználjuk az idő tükrözési invarianciát, a CVC hipotézist, a G -paritás megmaradást és a Cabibbo hipotézist.

1. T invariancia

Az időtükrözés transzformációja felcseréli a kezdő és végállapotokat és a hármas impulzusok és spin vektorok előjelét megfordítja. Könnyű megmutatni, hogy az idő-invariancia akkor teljesül, ha a formfaktorok valósak. (Ez abban a közelítésben igaz, ha eltekintünk a végállapotbeli kölcsönhatásoktól — elektron, hadron Coulomb szórás. Ha ez jelen van, akkor nem használható az egyszerű síkhullám közelítés, egy fáziseltolódás történik, amely úgy lép fel, mintha T invariancia sértés lenne.)

2. CVC

Kísérleti tény, hogy a neutron bomlásban a vektor csatolási állandó C_v^β jó közelítéssel egységnyi, azaz megegyezik a μ -bomlás vektor csatolási állandójával (univerzalitás). Ugyanakkor a proton elektromos töltése is egységnyi. A töltés viszont megegyezik a $C_p(q^2)$ formfaktor $q^2=0$ impulzusátadásnál vett értékével. Tekintsük most a következő mátrixelemek izovektor részét:

$$\lim_{q^2 \rightarrow 0} \langle p | J_{EM}^z | p \rangle = C_p(0) \left[\bar{u}' \gamma^z \frac{c_3}{2} u \right]$$

$$\lim_{q^2 \rightarrow 0} \langle p | j_1^z + i j_2^z | n \rangle = C_v^\beta [\bar{u}' \gamma^\mu c^+ u]$$

$$C_v^\beta \approx C_p(0) = 1$$

$$u_{\text{proton}} = \frac{1}{2} (1 + c_3) u$$

$$u_{\text{neutron}} = \frac{1}{2} (1 - e_3) u.$$

A fenti két egyenlet azt sugallja, hogy j_1 , j_2 , $j_3 \equiv J_{EM}$ egy izotriplet vektor áramopérátor 3 tagja. Mivel $j_3 \equiv J_{EM}$ megmaradó, így a többi két komponensnek is megmaradónak kell lennie. Ebből viszont az következik, hogy a skalár gyenge formfaktor zérus ($f_3=0$).

3. G -paritás megmaradás

A G -paritás transzformáció a töltés konjugáció és az I_2 izotengely körüli 180° forgatás szorzata. Az erős kölcsönhatás G -paritás őrző. Ha gondolatban kikapcsolnánk az erős kölcsönhatást, akkor a β -bomlás mátrixelemének csak vektor és axiálvektor komponense lenne, amelyek meghatározott G -paritással rendelkeznek. Az erős

kölcsönhatás jelenléte indukálja a skalár és tenzor formfaktorokat. Ezek G szimmetriájának meg kell egyeznie a vektor komponensek szimmetriájával. (G -paritás megmarad.) Ebből következik, hogy $f_3 = g_2 = 0$. Ezeket a tagokat „second-class” áramoknak is hívják.

4. Cabibbo hipotézis

Azt a CVC hipotézisnél már láttuk, hogy az elektromágneses és a ritkaság őrző vektor áramokat, egy izotriplet 3 tagjának tekintjük. A Cabibbo elmélet ezt kiterjeszti, és az összes hadron gyenge áramot 2 oktetbe helyezi. (Külön a vektor és külön az axiálvektor áramokat.) Ezenkívül feltételezi, hogy a teljes hadron gyenge áramban a ritkaság őrző áramok $\cos \theta$ súllyal a ritkaságváltók pedig $\sin \theta$ súllyal, szerepelnek, ahol θ a Cabibbo szög.

A Cabibbo hipotézis felhasználásával kiszámíthatók a hyperonok vektor és axiálvektor gyenge formfaktorai zérus impulzus átadás határesetében, elhanyagolva a gyenge mágnességet, indukált pseudoskalár, stb. korrekciókat és feltételezve a hyperonokra a teljes $SU(3)$ flavour szimmetriát. A csatolási állandókra ekkor a következőket kapjuk:

$ AS =0$	Axiálvektor csatolás $g_1(0)$		Vektor csatolás $f_1(0)$
1. $n \rightarrow pe^- \bar{\nu}$	$\cos \theta x$	$D + F$	1
2. $\Sigma^- \rightarrow \Sigma^0 1^- \bar{\nu}$	$\cos \theta x$	$\sqrt{2}F$	$\sqrt{2}$
3. $\Sigma^- \rightarrow \Lambda^0 1^- \bar{\nu}$	$\cos \theta x$	$\sqrt{2/3}\bar{D}$	0
4. $\Sigma^+ \rightarrow \Lambda^0 1^+ \nu$	$\cos \theta x$	$\sqrt{2/3}\bar{D}$	0
5. $\Xi^- \rightarrow \Sigma^0 1^- \bar{\nu}$	$\cos \theta x$	$D - F$	-1
$ AS =1$			
6. $\Sigma^- \rightarrow n 1^- \bar{\nu}$	$\sin \theta x$	$D - F$	-1
7. $\Lambda^0 \rightarrow p 1^- \bar{\nu}$	$\sin \theta x$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}(D + 3F)$	$-\frac{3}{\sqrt{6}}$
8. $\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 1^- \bar{\nu}$	$\sin \theta x$	$-\frac{1}{\sqrt{6}}(D - 3F)$	$\frac{3}{\sqrt{6}}$
9. $\Xi^- \rightarrow \Sigma^+ 1^- \bar{\nu}$	$\sin \theta x$	$D + F$	1
10. $\Xi^- \rightarrow \Sigma^0 1^- \bar{\nu}$	$\sin \theta x$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(D + F)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$

Az F , D és θ paramétereket a kísérleti eredmények fittelésével lehet megkapni. Ez egyben módot nyújt a Cabibbo elmélet helyességének vizsgálatára is.

A sugárzási korrekciók csoportosítása a következőképpen történt. Azon foton korrekcióknál, ahol egyidejűleg lépett fel az UV és IR divergencia, a foton propagátort

oly módon írtuk szét, hogy ezen divergenciák is különváljanak (4.1.) Az UV divergenciákat tartalmazó fotonkorrekciókat a tiszta gyenge korrekciókkal együtt számoljuk. Mennyiben nyújt újat a $W-S$ elmélet alkalmazása? Először is a renormálás pontosan végigvihető, tehát a divergenciák eltávolíthatók. Másodszor nem egészen triviális, hogy a virtuális vektorbozon járulékok a nagy tömeg miatt elhanyagolhatók az α -rendű korrekciók mellett, ezért szükséges a renormálás végrehajtása után megmaradt véges járulékok kiszámítása.

A kontratagok meggyártásában és a levonási pontok rögzítésében *Sirlin* [18] eljárását követjük, amely több szempontból is előnyös. Megmutatható, hogy a μ -bomlás „gyenge” korrekciói mind beolvaszthatók a Fermi csatolási állandó átrenormálásába. Ekkor kapcsolatot kapunk a L függvényben szereplő csatolási állandó és a mért Fermi csatolási állandó között is. A bomlás gyenge korrekcióinak számolásában nehézséget okoz a hadron vertexnél jelenlevő erős kölcsönhatás. Ezekben az esetekben megmutatható, hogy a loop integrálokban csak a nagy loop impulzusú tartomány ad $G_F\alpha$ rendű korrekciókat, így a hadron áram mátrixelemek kiszámításánál alkalmazható a Wilson kifejtés. Ennek vezető tagja ekvivalens a szabad kvarkmodell alkalmazásával.

A β -bomlás gyenge korrekcióinak kiszámítása után kiderül, hogy a box gráfok kivételével a járulékok univerzálisak, azaz megegyeznek a μ -bomlás megfelelő gyenge korrekcióival. Végeredményül a gyenge korrekciók numerikus értéke 0,03%-nak adódik. Ez a néhány százalékos foton korrekciók mellett elhanyagolható lesz.

A megmaradt foton korrekciók már UV végesek, de IR divergenciákat tartalmaznak. Az IR divergenciák kezeléséhez bevezetünk egy λ kicsiny foton tömeget [2]. A bremsstrahlung korrekciók hozzáadásával ezek a divergenciák is kiesnek. Ezeket a foton korrekciókat az irodalomban már tárgyalták [14, 15, 17]. Ezeket a folyamatokat nem lehet anélkül kiszámítani, hogy valamilyen feltételezéseket ne tennénk az erős kölcsönhatásra. Mi pontoszerű csatolást tételezünk fel a foton és a töltött hadron között. Ahogy ezt már említettük számolásainkban nem szorítkozunk a lágy fotonokra, hanem az integrálást a foton impulzus teljes fázisterére kiterjesztjük. A 2. fejezetben röviden ismertetjük a Weinberg—Salam elméletet, megadjuk a teljes Lagrange függvényt, rögzítjük a mértéket és a gráfszabályokat. A 3. fejezetben ismertetjük a renormálási eljárásunkat, kiszámítjuk a kontratagokat. Ehhez szükséges a lepton-foton vertex egy loop szinten való kiszámítása a töltés definiálása szempontjából. A 4. fejezetben alkalmazzuk a renormálási eljárásunkat a μ -bomlás 1 loop rendű kiszámítására. Ez abból a szempontból is fontos, hogy kapcsolatot teremtsünk a Fermi csatolási állandó és a Lagrange függvény paramétereinek között. Az 5. fejezetben kiszámítjuk a β -bomláshoz a gyenge és foton korrekciókat. Végezetül a 6. fejezetben szó lesz a numerikus kiértékelésről és ismertetjük a numerikus eredményeket a különböző eloszlásokra és folyamatokra.

2. WEINBERG-SALAM ELMÉLET

Az $SU(2) \times U(1)$ elmélet [1] egy spontán sérült lokális mértékelmélet, amely renormálható [19, 20]. Ebben a fejezetben megadjuk a Lagrange függvényt, rögzítjük a mértéket és felsoroljuk a gráfokat.

2.1. Lagrange függvény

Egy általános mértékelmélet Lagrange függvénye a következő alakú

$$L = L_{\text{YM}} + L_{\text{fermion}} + L_{\text{Higgs}} + L_{\text{Yukawa}}, \quad (2.1.1)$$

ahol a L_{fermion} tartalmazza az elméletben szereplő fermionokat (esetünkben ψ_L balkezes izodoublett és egy e_R jobbkezes szinglett), L_{YM} a mértékterek L -függvénye (esetünkben A_μ^a triplett és B_μ szinglett), L_{Higgs} a spontán szimmetriasértéshez szükséges skalárterek Lagrange függvénye (esetünkben egy K skalár izodoublett), míg L_{Yukawa} tartalmazza a kölcsönhatást a fermionok és a skalár között.

Lehetne például:

$$L = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} - \bar{\psi} \not{D} \psi - |D_\mu \Phi|^2 - V(\Phi^\dagger \Phi) - \bar{\psi} \Gamma \psi \Phi, \quad (2.1.2)$$

$$L_{\text{YM}} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{\mu\nu a} - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g \epsilon^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu \quad (2.1.3)$$

$$L_{\text{fermion}} = -\bar{\psi}_L \not{D} \psi_L - \bar{e}_R \not{D} e_R$$

$$\psi_L = \begin{pmatrix} \nu \\ e \end{pmatrix}_L \equiv \frac{1+\gamma_5}{2} \begin{pmatrix} \nu \\ e \end{pmatrix}$$

$$D_\mu \psi_L = \left(\partial_\mu - \frac{i}{2} g c^a A_\mu^a - \frac{i}{2} g' B_\mu \right) \psi_L$$

$$D_\mu e_R = (\partial_\mu - i g' B_\mu) e_R \quad (2.1.4)$$

$$L_{\text{Higgs}} = -(D_\mu K)^\dagger (D_\mu K) - \mu K^\dagger K - \frac{1}{2} \lambda (K^\dagger K)^2$$

$$K = K_0 + K' = \begin{pmatrix} F \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} (Z + i\tau\varphi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$K = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} Z + \sqrt{2}F + i\varphi^0 \\ \sqrt{2}i\varphi^- \end{pmatrix}$$

$$\varphi^0 \equiv \varphi^3 \quad \varphi^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi^1 \pm i\varphi^2)$$

$$D_\mu K = \left(\partial_\mu - \frac{1}{2} i g \tau^a A_\mu^a - \frac{1}{2} i g' B_\mu \right) K$$

$$F = -\frac{\mu}{\lambda} \quad (2.1.5)$$

$$L_{\text{Yukawa}} = -G \{ \bar{\psi}_L \tilde{K} \} e_R + \text{h.c.} \} \quad \tilde{K} \equiv i\tau_2 K^* \quad (2.1.6)$$

A fizikai terek a következőképpen fejeződnek ki.

$$W_\mu^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_\mu^1 \mp i A_\mu^2) \quad W_\mu^0 = c A_\mu^3 - s B_\mu \quad A_\mu = s A_\mu^3 + c B_\mu \quad (2.1.7)$$

$$s \equiv \sin \theta_w \quad c \equiv \cos \theta_w.$$

A (2.1.5.) Higgs tag potenciálja okozza a spontán szimmetriasértést. A Higgs térnek véges vákuum várható értéke (VVÉ) van, amely fa gráf szinten éppen a potenciál minimuma. Egy loop szinten természetesen a minimum eltolódik. Ekkor mindig generálódik a tadpole tag. A kontratagokat lehet úgy választani, hogy ezek eltűnjenek. Erre a problémára később még visszatérünk. A VVÉ generálja a fermion és vektorbozon tömegeket.

2.2. Mérték rögzítés. Ghostok

A Lagrange függvényünk még nem teljes, szükségünk van még egy mértékrögzítő tagra, és az unitaritás biztosítására ghostokra. (Ez utóbbiak speciális mérték-választásnál eltűnhetnek). Mi a 't Hooft—Feynmann mértéket fogjuk használni.

$$L_{\text{mérték}} = -\frac{1}{2\alpha} (-\partial_\mu A_\mu^a + \alpha M \varphi^a)^2 - \frac{1}{2\alpha} \left(-\partial_\mu B_\mu + \alpha \frac{-s}{c} M \varphi^0 \right)^2 \quad (2.2.1)$$

$$M = \frac{1}{\sqrt{2}} g F, \quad \alpha = 1$$

α tetszőleges véges értékénél ezt renormálható mértéknek is nevezik, mivel ebben az esetben a propagátorok aszimptotikus viselkedése helyes. Az $\alpha=1$ választás esetén a propagátorok alakja igen egyszerű, amely jelentősen egyszerűsíti a számolásokat. Lényeges hátrányt jelent viszont az, hogy szükséges a ghostok bevezetése. (Fadeev—Popov és Higgs—Kibble ghostok).

Ezek olyan terek, amelyek az elmélet nem fizikai szabadsági fokait tüntetik fel és végállapotban nem fordulnak elő. A mi esetünkben (négyfermionos folyamatok) szerencsére csak a vektormezon sajátenergiánál jönnek be. Az FP-ghostok nem csatolódnak a fermionokhoz a Higgs-ghostok csatolása a fermionokhoz viszont lényegesen el van nyomva. Az $\alpha \rightarrow \infty$ határeset felel meg az unitér mértéknek. Ebben az esetben nincsenek ghostok, csak fizikai részecskék, tehát az unitaritás nyilvánvaló, de a propagátorok aszimptotikus viselkedése megváltozik, ezzel egyidejűleg elromlik a renormálhatóság is. Ebben a mértékben könnyebbek a számolások abból a szempontból, hogy nincsenek ghostok, viszont extra divergenciák lépnek fel, amelyekhez több kontratagot kell bevezetni [22]. A Lagrange függvény részletes kiírását a ghost tagokkal együtt az A) függelékben adjuk meg. Itt soroljuk fel a gráfszabályokat is.

3. RENORMALÁLÁS

A perturbációs számítás során már egy loop szinten is ultraviola divergenciák lépnek fel. Először tehát regularizálnunk kell. Ehhez a dimenziós regularizálást választjuk, amely könnyű kezelhetősége mellett a mérték invarianciát is megőrzi; vagyis a Ward-azonosságok érvényesek lesznek a számolás során, amelyek lehetőséget adnak a számolások helyességének ellenőrzéséhez.

A másik lényeges pontja a renormálásnak a levonási eljárás rögzítése, ami magában foglalja egyrészt a kontratagok meggyártását, másrészt a kontratagok rögzítését. Ekkor egyidejűleg rögzítjük a Lagrange függvényben szereplő paramétereket is. Mindkét esetben igen sok szabadságunk van. Nem fogunk bevezetni renormált tereket, ezzel lényegesen leegyszerűsödik a Lagrange függvény. Ezt azért tehetjük meg, mert mindig S -mátrix elemeket fogunk számolni, amelyek már végesek lesznek, ellentétben a Green-függvényekkel, amelyek ebben az esetben divergenciákat fognak tartalmazni. Mi az impulzustérbeli levonást (MOM) helyezzük előtérbe a minimális levonással szemben, méghozzá olyan impulzus-pontokban, hogy az elmélet renormált paramétereinek közvetlen fizikai jelentésük legyen. Így például a tömeg-kontratagokat úgy rögzítjük, hogy a teljes propagátoroknak éppen a fizikai tömegnél legyen pólusuk, és a töltés renormálást is tömeghéjon és $q=0$ foton impulzusnál végezzük el, mint ahogy Sirlin [18] rögzítette a renormálási eljárását. A következők voltak nála a szempontok:

- i) Alkalmazhatóság a folyamatok széles skálájára.
- ii) A renormált paraméterek legyenek infravörös végesek és mértékinvariánsak (vagyis a fizikai mennyiségekkel szoros kapcsolatban álljanak). Ez jelentős megszorítást ad a levonási pontok kiválasztásában.
- iii) Lehetséges úgy definiálni a renormálási paramétereket, hogy a sugárzási korrekciók kicsinyek legyenek. Más szavakkal, nagy korrekciók elkerülhetők értelmes választással! [12]

Az $SU(2) \times U(1)$ elméletben a paraméterek a két csatolási állandó, g és g' ; és a Higgs tér vákuum várható értéke, F . Ezen kívül még vannak a Yukawa csatolási állandók, amelyeknek egy része a fermiontömegekkel kifejezhető. Fa gráf szinten a paraméterek között több természetes reláció áll fenn. Ilyenek például

$$c = g \sin \theta_w, \quad \cos \theta_w = \frac{M_w}{M_{w^0}}, \quad g' = g \tan \theta_w, \quad \frac{G_F}{\sqrt{2}} = \frac{g^2}{8M_w^2}.$$

Fa gráf szinten (nincsenek magasabb rendű korrekciók) ezek egyidejűleg a csupasz és a renormált mennyiségek. Ekkor nincsenek divergenciák, tehát kontratagokra sincs szükség. Amikor loop korrekciókat számolunk, a fenti relációk közül néhány véges járulékot fog kapni. Mi úgy fogjuk megválasztani a kontratagjainkat, hogy minél több relációt őrizzünk meg. A továbbiakban először meggyártjuk a kontratagokat a mértékbozon és a fermion-mértékbozon kölcsönhatási szektorban, lerögzítve a tömeg és csatolási állandó kontratagokat, majd a töltés renormálását vizsgáljuk meg.

3.1. A kontratagok meggyártása a mértékbozon szektorban

A folyamatok nagy része (köztük a β -bomlás) olyan, hogy egy vektorbozon cserélődik ki. Emiatt mindenképpen szükséges a vektorbozon szektor vizsgálata. A vektorbozon tömegeket a Higgs kinetikus energia tagból kapjuk (2.1.5.) a Higgs tér vákuum várható értékének beírásával

$$L_M^{(vB)} = -\frac{F_0^2}{2} \left\{ g_0^2 W_\mu^+ W_\mu^- + \frac{1}{2} (g'_0 B_\mu + g_0 A_\mu^3)^2 \right\}. \quad (3.1.1)$$

Itt a terek és a csatolási állandók csupaszok. Generáljunk kontratagokat a következőképpen

$$g_0 = g - \delta g; \quad g'_0 = g' - \delta g'; \quad F_0^2 = F^2 - \delta F^2 \quad (3.1.2)$$

és vezessünk be új renormálatlan tereket

$$A_\mu^3 = c W_\mu^0 + s A_\mu \quad (3.1.2.a)$$

$$B_\mu = -s W_\mu^0 + c A_\mu. \quad (3.1.2.b)$$

Ekkor (3.1.1.) a következő alakú lesz:

$$L_M^{(vB)} = -\frac{(F^2 - \delta F^2)}{2} \left\{ (g - \delta g)^2 W_\mu^+ W_\mu^- + \frac{1}{2} [(gc - g's) W_\mu^0 + (gs + g'c) A_\mu - (\delta gc - \delta g's) W_\mu^0 - (\delta gs + \delta g'c) A_\mu]^2 \right\} \quad (3.1.3)$$

Diagonizáljuk a tömegmátrixot, elhagyva az

$$O[(\delta g)^2, (\delta g')^2, (\delta g)(\delta g') \dots]$$

tagokat.

$$\tan \theta_w = -\frac{g'}{g} \quad (3.1.4)$$

$$L_M^{(vB)} = -M_w^2 W_\mu^+ W_\mu^- + \delta M_w^2 W_\mu^+ W_\mu^- - \frac{1}{2} M_{w^0}^2 W_\mu^0 W_\mu^0 + \frac{1}{2} \delta M_{w^0}^2 W_\mu^0 W_\mu^0 - \delta M_{w^0 A}^2 W_\mu^0 A_\mu, \quad (3.1.5)$$

ahol

$$M_w^2 = \frac{F^2 g^2}{2}, \quad \delta M_w^2 = \frac{F^2 \delta g^2 + g^2 \delta F^2}{2} \quad (3.1.6)$$

$$M_{w^0}^2 = \frac{F^2 (g^{12} + g^2)}{2}, \quad \delta M_{w^0}^2 = \frac{\delta F^2 (g^2 + g^{12}) + F^2 \delta (g^2 + g^{12})}{2} \quad (3.1.7)$$

$$\delta M_{w^0 A}^2 = \frac{F^2}{2} (g^2 + g^{12})^{1/2} (\delta gs + \delta g'c) = \frac{M_{w^0}^2}{(g^2 + g^{12})^{1/2}} (\delta gs + \delta g'c).$$

Az új kontratag gráfjaink:

$$\begin{array}{ccc} W_\mu & W_\nu & W_\mu^0 \\ \text{---} \times \text{---} & \text{---} \times \text{---} & \text{---} \times \text{---} \\ W_\nu & W_\nu^0 & A_\nu \end{array}$$

$$(2\pi)^4 i \delta_{\mu\nu} \delta M_w^2 \quad (2\pi)^4 i \delta_{\mu\nu} \delta M_{w^0}^2 \quad - (2\pi)^4 i \delta_{\mu\nu} M_{w^0}^2 A.$$

A következő megjegyzéseket kell hozzáfűznünk az előbbi számolásokhoz:

1. δM_w^2 , $\delta M_{w^0}^2$, $\delta M_{w^0 A}^2$ kiszámításánál elhagytuk a δg , $\delta g'$, δF^2 szorzatait és magasabb hatványait. Ezek a tagok több loop szinten lennének érdekesek.
2. $A_\mu A_\mu$ kontratag nem generálódott! (1 loop szinten).
3. $W_\mu^0 A_\mu$ kontratagunk viszont van. (Erről később még szó lesz.)
4. Hullámfüggvény kontratagokat nem generáltunk. Ez nagy egyszerűsítést jelent.

Végig csupasz terekkel dolgozunk majd.

Most már M_w és M_{w^0} két renormált paraméter, de még értéküket nem rögzítettük. Ehhez egy „fizikai” levonási eljárást választunk:

Rögzítsük úgy δM_w^2 és $\delta M_{w^0}^2$ -t, hogy M_w és M_{w^0} a vektorbozonok fizikai tömegei legyenek, vagyis a „teljes” propagátor pólusai

$$\text{---} \bigcirc \text{---} = \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \delta M_{w, w^0}^2$$

$$\tilde{\pi}_{ww}^{\mu\nu}(q^2) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4 i} \pi_{ww}^{\mu\nu}(q^2) = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{ww}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{ww}(q^2) q_\mu q_\nu] \quad (3.1.8a)$$

$$\tilde{\pi}_{w^0 w^0}^{\mu\nu}(q^2) = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{w^0 w^0}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{w^0 w^0}(q^2) q^\mu q^\nu]. \quad (3.1.8b)$$

Az előbbieket alapján a kontratagok a következők:

$$\delta M_w^2 = -\frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re } A_{ww}(-M_w^2) - \tilde{t}_{ww} \quad (3.1.9a)$$

$$\delta M_{w^0}^2 = -\frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re } A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2) - \tilde{t}_{w^0 w^0} \quad (3.1.9b)$$

t_{ww} és $t_{w^0 w^0}$ a tadpole és tadpole kontratag járulékok. Több eljárás ismeretes kezelésükre. Például definiálhatjuk úgy az F -et, hogy az az igazi vákuum érték legyen. Ekkor $t_{ww} = t_{w^0 w^0} = 0$. Mi rugalmasabban járunk el az általánosság kedvéért és meghagyjuk a t -ket. Ezek majd később úgyis kiesnek a következő reláció miatt.

$$c^2 t_{w^0 w^0} = t_{ww} \Rightarrow \frac{t_{w^0 w^0}}{M_{w^0}^2} = \frac{t_{ww}}{M_w^2}.$$

A (3.1.4) és (3.1.6) miatt

$$\cos^2 \theta_w = \frac{M_w^2}{M_{w^0}^2}. \quad (3.1.10)$$

Tehát a mi eljárásunkban a θ_w a fizikai tömegek által van definiálva. Előnyei:

1. (3.1.10)-hez már nincs α -rendű korrekció,

2. θ_w mértékinvariáns.

A (3.1.2.) helyett másképpen is bevezethettük volna az új tereket.

$$A_\mu^3 = c_0 W_\mu^{0'} + s_0 A_\mu'$$

$$B_\mu = -s_0 W_\mu^{0'} + c_0 A_\mu'.$$

A W_μ^0 és A_μ terek a $W_\mu^{0'}$ és A_μ' terekből egy $\theta_w^0 - \theta_w$ forgással állnak elő. Itt a tömegtagok meggyártása után a diagonalizáláshoz

$$\operatorname{tg} \theta_w^0 = -\frac{g_0'}{g_0}$$

értéket kell beírni. Most

$$c_0^2 = \frac{M_{0w}^2}{M_{0w^0}^2} = \frac{M_w^2 - \delta M_w^2}{M_{w^0}^2 - \delta M_{w^0}^2} = c^2(1 + \delta c^2) \equiv c^2 \left(1 + \frac{\delta M_{w^0}^2}{M_{w^0}^2} - \frac{\delta M_w^2}{M_w^2} \right).$$

Látjuk, hogy ha így definiáljuk a θ_w -t, akkor véges járulékokat kapunk α -rendben.

$$c = c_0(1 + O(\alpha)) = c_0(1 - \delta c^2).$$

Ebben az esetben

$$L_M^{(vB)} = -M_w^2 W_\mu^+ W_\mu^- + \delta M_w^2 W_\mu^+ W_\mu^- - \\ - \frac{1}{2} M_{w^0}^2 W_\mu^{0'} W_\mu^{0'} + \frac{1}{2} \delta M_{w^0}^2 W_\mu^{0'} W_\mu^{0'}.$$

Itt tehát *nincs* $W_\mu^{0'} A_\mu'$ típusú kontratagunk!

A (3.1.7.) és (3.1.9.) felhasználásával két összefüggést kapunk a δg , $\delta g'$ és δF^2 kontratagokra. Kiküszöbölve δF^2 -t és felhasználva (3.1.7.)-et:

$$\delta M_{w^0 A}^2 = -\frac{M_w^2}{2sc} \operatorname{Re} \left[\frac{A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} + O(\alpha^2) \right] \frac{g^2}{16\pi^2}. \quad (3.1.11)$$

Ez a kontratag jelentős szerepet fog játszani a semleges áram folyamatokban. Érdeemes megjegyezni, hogy mindhárom tömegkontratag *nagy impulzusnál* van definiálva (M_w^2 , $M_{w^0}^2$).

3.2. Mértékbozon-fermion kölcsönhatási szektor

A fermion-bozon kölcsönhatási tagokat a (2.1.4.) kinetikus tagból kapjuk.

$$L_{\text{int}} = i\bar{\psi}[g_0 T^a A_\mu^a - g_0' T^0 B_\mu]\gamma^\mu \psi. \quad (3.2.1)$$

Az előzőekhez hasonlóan új tereket bevezetve

$$W_\mu^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} (A_\mu^1 \mp iA_\mu^2); \quad A_\mu^3 = cW_\mu^0 + sA_\mu; \quad B_\mu = -sW_\mu^0 + cA_\mu. \quad (3.2.2)$$

Ekkor L_{int} a következő lesz

$$\begin{aligned}
 L_{\text{int}} &= i\bar{\psi} \left[\frac{g_0}{\sqrt{2}} (T^+ W_\mu^+ + T^- W_\mu^-) + (g_0 s T^3 - g'_0 c T^0) A_\mu + \right. \\
 &\quad \left. + (g_0 c T^3 + g'_0 s T^0) W_\mu^0 \right] \gamma^\mu \psi. \\
 T^+ &= T^1 + iT^2; \quad T^- = T^1 - iT^2.
 \end{aligned} \tag{3.2.3}$$

Hasonlóképpen kontratagokat generálva

$$\begin{aligned}
 g_0 &= g - \delta g \\
 g'_0 &= g' - \delta g' \\
 \text{tg } \theta_w &= -\frac{g'}{g}
 \end{aligned} \tag{3.2.4}$$

$$L_{\text{int}} = \hat{L}_{\text{int}} + \delta L_{\text{int}} \tag{3.2.5}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_{\text{int}} &= i\bar{\psi} \left[\frac{g}{\sqrt{2}} (T^+ W_\mu^+ + T^- W_\mu^-) + g s (T^3 + T^0) A_\mu + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{g}{c} (T^3 - s^2 [T^3 + T^0]) W_\mu^0 \right] \gamma^\mu \psi.
 \end{aligned} \tag{3.2.6}$$

Vezessük be a következő jelöléseket

$$\begin{aligned}
 Q &= T^3 + T^0 & T^3 &= T_{w^0} + s^2 Q \\
 T_{w^0} &= T^3 - s^2 Q & T^0 &= -T_{w^0} + c^2 Q
 \end{aligned} \tag{3.2.7}$$

$$\hat{L}_{\text{int}} = i\bar{\psi} \left[\frac{g}{\sqrt{2}} T^+ W_\mu^+ + \frac{g}{\sqrt{2}} T^- W_\mu^- + g s Q A_\mu + \frac{g}{c} T_{w^0} W_\mu^0 \right] \gamma^\mu \psi \tag{3.2.8}$$

$$\begin{aligned}
 \delta L_{\text{int}} &= i\bar{\psi} [(c^3 \delta g' - s^3 \delta g) Q A_\mu - (\delta g' c + \delta g s) T_{w^0} A_\mu + \\
 &\quad + (s \delta g' - c \delta g) T_{w^0} W_\mu^0 - (\delta g s + c \delta g') s c Q W_\mu^0] \gamma^\mu \psi + \\
 &\quad + i\bar{\psi} \left[-i \frac{\delta g}{\sqrt{2}} (T^+ W_\mu^+ + T^- W_\mu^-) \right] \gamma^\mu \psi.
 \end{aligned} \tag{3.2.9}$$

Legyen

$$\begin{aligned}
 J_A^\mu &= \bar{\psi} \gamma^\mu Q \psi \\
 J_w^{\pm \mu} &= \bar{\psi} \gamma^\mu T^\pm \psi
 \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

$$\hat{L}_{\text{int}} = \frac{ig}{\sqrt{2}} (J_w^{+\mu} W_\mu^+ + J_w^{-\mu} W_\mu^-) + i g s J_A^\mu A_\mu + \frac{ig}{c} J_{w^0}^\mu W_\mu^0 \tag{3.2.11}$$

$$\begin{aligned}
 \delta L_{\text{int}} &= i(c^3 \delta g' - s^3 \delta g) J_A^\mu A_\mu - i(\delta g' c + \delta g s) J_{w^0}^\mu A_\mu + \\
 &\quad + i(s \delta g' - c \delta g) J_{w^0}^\mu W_\mu^0 - i(\delta g s + c \delta g') s c J_A^\mu W_\mu^0 - \\
 &\quad - i \frac{\delta g}{\sqrt{2}} (J_w^{+\mu} W_\mu^+ + J_w^{-\mu} W_\mu^-).
 \end{aligned} \tag{3.2.12}$$

Most beírhatjuk a fermionreprezentációkat, hogy megkaphassuk a gráfszabályokat. A kvarkok hullámfüggvényei:

$$\psi_{Li} = \begin{pmatrix} u \\ d' \end{pmatrix}_{iL} \begin{pmatrix} c \\ s' \end{pmatrix}_{iL} \begin{pmatrix} t \\ b' \end{pmatrix}_{iL} \dots \quad (i = 1, 2, 3)$$

$$T = \frac{1}{2} \quad Y = \frac{1}{3}$$

$$\psi_{Ri} = u_{Ri}, d'_{Ri}, c_{Ri}, s'_{Ri}, t_{Ri}, b'_{Ri} \dots$$

$$Q = \frac{2}{3}, \quad -\frac{1}{3} \quad (3.2.13)$$

$$Y = \frac{4}{3}, \quad -\frac{2}{3}$$

$$T = 0$$

$$\begin{pmatrix} d' \\ s' \\ b' \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} d \\ s \\ b \end{pmatrix}$$

(3.2.14)

$$A = \begin{pmatrix} c_1 & -s_1 c_3 & -s_1 s_3 \\ s_1 c_2 & c_1 c_2 c_3 - s_2 s_3 e^{i\delta} & c_1 c_2 c_3 + s_2 c_3 e^{i\delta} \\ s_1 s_2 & c_1 s_2 c_3 + c_2 s_3 e^{i\delta} & c_1 c_2 s_3 - c_2 c_3 e^{i\delta} \end{pmatrix}$$

$A^+ = A^{-1}$ Kobayashi—Maskawa mátrix.

A leptonok hullámfüggvényei:

$$\psi_L = \begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix}_L \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix}_L \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix}_L, \quad T = \frac{1}{2}, \quad Y = -1$$

$$Q = 0, -1$$

(3.2.15)

$$\psi_R = e_R, \mu_R, c_R \quad T = 0, \quad Y = -2$$

$$Q = T^3 + Y/2 \quad A = \mathbf{1}.$$

A Lagrange-függvény kiírva:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\text{int}} = & \frac{ig}{\sqrt{2}} \bar{u} \gamma^\mu P_L d' W_\mu^+ + \frac{ig}{\sqrt{2}} \bar{d}' \gamma^\mu P_L u W_\mu^- + \\ & + ig s e_u \bar{u} \gamma^\mu u A_\mu + ig s e_d \bar{d}' \gamma^\mu d' A_\mu + \\ & + \frac{ig}{c} \bar{u} \gamma^\mu [a_u^L P_L + a_u^R P_R] u W_\mu^0 + \frac{ig}{c} \bar{d}' \gamma^\mu [a_d^L P_L + a_d^R P_R] d' W_\mu^0 \end{aligned} \quad (3.2.16)$$

$$P_L \equiv \frac{1 + \gamma_5}{2}, \quad P_R \equiv \frac{1 - \gamma_5}{2}$$

$$\begin{aligned}
e_v &= 0, \quad a_v^L = \frac{1}{2}, \quad a_v^R = 0 \\
e_c &= -1, \quad a_c^L = s^2 - \frac{1}{2}, \quad a_c^R = s^2 \\
e_u &= \frac{2}{3}, \quad a_u^L = \frac{1}{2} - \frac{2}{3}s^2, \quad a_u^R = -\frac{2}{3}s^2 \\
e_d &= -\frac{1}{3}, \quad a_d^L = -\frac{1}{2} + \frac{1}{3}s^2, \quad a_d^R = \frac{1}{3}s^2
\end{aligned} \tag{3.2.17}$$

$$\delta L_{\text{int}} = -i \frac{\delta g}{\sqrt{2}} [\bar{u} \gamma^\mu P_L d' W_\mu^+ + \bar{d}' \gamma^\mu P_L u W_\mu^-] +$$

$$\begin{aligned}
& \begin{array}{c} u \\ \swarrow \\ d' \end{array} \begin{array}{c} w_\mu^+ \\ \swarrow \\ d' \end{array} \frac{ig}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L \begin{array}{c} u, d' \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} A_\mu \quad ig s e_{u,d} \gamma^\mu \\
& \begin{array}{c} d' \\ \swarrow \\ u \end{array} \begin{array}{c} w_\mu^- \\ \swarrow \\ u \end{array} \frac{ig}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L \begin{array}{c} u, d' \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} w_\mu^0 \quad \frac{ig}{c} \gamma^\mu [a_{u,d}^L P_L + a_{u,d}^R P_R] \\
& + i(c^3 \delta g' - s^3 \delta g) [e_u \bar{u} \gamma^\mu u + e_d \bar{d}' \gamma^\mu d'] A_\mu - \\
& - i(c \delta g' + s \delta g) [\bar{u} \gamma^\mu (a_u^L P_L + a_u^R P_R) u + (u \leftrightarrow d')] A_\mu + \\
& + i(s \delta g' - c \delta g) [\bar{u} \gamma^\mu (a_u^L P_L + a_u^R P_R) u + (u \leftrightarrow d')] W_\mu^0 - \\
& - i(\delta g s + c \delta g') s c [e_u \bar{u} \gamma^\mu u + e_d \bar{d}' \gamma^\mu d'] W_\mu^0.
\end{aligned} \tag{3.2.18}$$

$$\begin{aligned}
& \begin{array}{c} u \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} \begin{array}{c} w_\mu^- \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} - \frac{i \delta g}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L \begin{array}{c} u \\ \swarrow \\ d' \end{array} \begin{array}{c} w_\mu^+ \\ \swarrow \\ d' \end{array} - \frac{i \delta g}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L \\
& \begin{array}{c} u, d' \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} A_\mu \quad i(c^3 \delta g' - s^3 \delta g) e_{u,d} \gamma^\mu - i(c \delta g' + s \delta g) \gamma^\mu [a_{u,d}^L P_L + a_{u,d}^R P_R] \\
& \begin{array}{c} u, d' \\ \swarrow \\ u, d' \end{array} w_\mu^0 \quad -i(s \delta g + c \delta g') s c e_{u,d} \gamma^\mu + i(s \delta g' - c \delta g) \gamma^\mu [a_{u,d}^L P_L + a_{u,d}^R P_R]
\end{aligned}$$

Minden vertexhez hozzá kell érteni $(2\pi)^4 i$ szorzófaktor!

3.3. A töltés renormálása

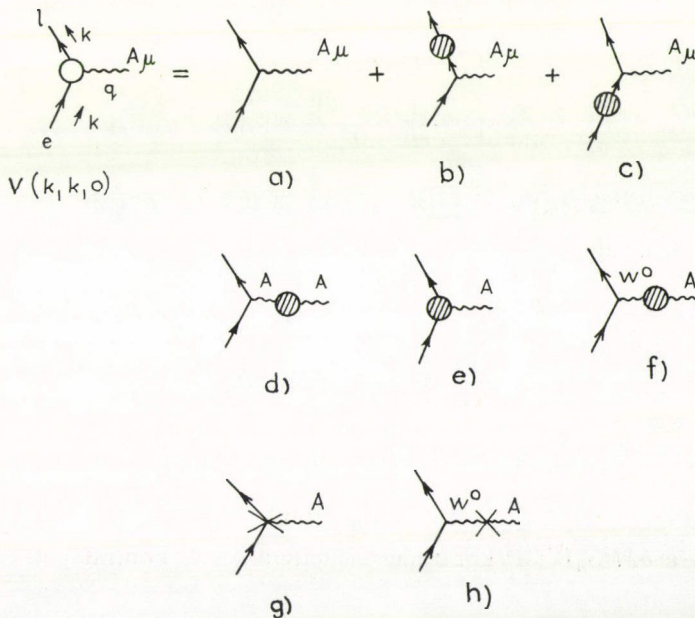
Eddig két egyenletet írtunk fel a kontratagokra (3.1.9a), (3.1.9b). Mivel három kontratagot kell rögzítenünk, szükségünk van egy harmadik egyenletre is. Az eddigi két renormálási feltételt úgy írtuk fel, hogy M_w^2 és $M_{w^0}^2$ a vektormezonok fizikai tömegei legyenek, vagyis a felöltöztetett propagátorok pólusai. A hátralevő egy feltételt a fermion-foton vertex értékének előírásával fogjuk megkapni. Az elektromos töltést a következőképpen akarjuk azonosítani:

$$e = g_s \quad |e| = +e \quad (\text{proton töltése}) \quad (3.3.1)$$

Ez az összefüggés egyértelműen meghatározza a g -t, méghozzá *mértékinvariáns* módon, továbbá a g paraméter *nem fog tartalmazni infravörös (IR) divergenciát*. Tekintsük a fermion-foton vertexet $q=0$ -nál (foton impulzus). Ez a definíció ezért lesz hasznos, mert ekkor

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi}, \quad g^2 = \frac{\alpha 4\pi}{s^2} \quad (3.3.2)$$

vagyis a g paraméterünk közvetlen kapcsolatban lesz egy igen jól mérhető fizikai mennyiséggel, a finomszerkezeti állandóval. A továbbiakban a feladatunk az lesz, hogy kiszámítsuk a fermion-foton vertexhez az összes egy loop korrekciókat, és a kontratagokat, majd úgy kell lerögzítenünk a kontratagokat, hogy $q=0$ -nál kiejtsék a magasabbrendű gráfokat. Ezzel elérjük azt, hogy a Lagrange függvényben szereplő g_s paraméterek (fa gráf járulékok) éppen a renormált, fizikai töltést adják. Rajzoljuk fel azokat a gráfokat, amelyek járulékokat adnak a fermion-foton vertexhez. A gráfok részletes kiírása és a számolások pontos elvégzése a C , D és E függelékben található. Érdemes megjegyezni, hogy tetszőleges fermionra elvégezhetnénk a számolást, mivel az eredmény független lesz a fermion tömegétől. (Az elektron és a μ -on töltése megegyezik!) Mi konkrétan az elektronra végezzük el a számolást.



A magasabb rendű korrekciók számolásánál ebben a fejezetben nem fogjuk eldobni a Higgs járulékokat az irreducibilis vertexhez és a fermion sajátenergiához, tehát nem használjuk fel az $\frac{m_f}{M}$ hányados kicsinységét a fermion-Higgs csatolásnál.

(A további fejezetekben ezt mindig megtesszük.) Így figyelemmel tudjuk kísérni, hogyan fog végül is kiesni ez m_f fermion-tömeg-függés.

A b , c és d gráfok fermion és foton sajátenergiás betétek. Ebben az esetben a külső „lábaknál” a hullámfüggvény renormálást kell elvégezni. Az e gráf a valódi vertex-járulékokat jelöli, az f pedig a W^0-A „mixing” tagokat. A g és h a két kontratag. Definíciónk szerint ez utóbbi két gráfnak ki kell ejteni a $b-f$ gráfok járulékát.

$$V(k, k, 0) = -igs(2\pi)^4 i\bar{u}(k)\Gamma^\mu(k, k, 0)u(k)\varepsilon_\mu. \quad (3.3.3)$$

Írjuk fel a Γ^μ -höz a különböző gráfok járulékait.

$$\Gamma_a^\mu = \gamma^\mu \quad (3.3.4)$$

$$\Gamma_{b+c}^\mu = \delta Z \gamma^\mu + \gamma^\mu \delta \bar{Z} = (\delta Z_L P_L + \delta Z_R P_R) \gamma^\mu$$

$$\delta Z = \frac{1}{2} (\delta Z_L P_L + \delta Z_R P_R)$$

$$\delta \bar{Z} = \frac{1}{2} (\delta Z_R P_L + \delta Z_L P_R) \quad (3.3.5)$$

$$\Gamma_d^\mu = \frac{1}{2} \delta Z^A \gamma^\mu \equiv \frac{1}{2} \Pi_A(0) \gamma^\mu$$

$$\tilde{\Pi}_{AA}^{\mu\nu}(q) = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{AA}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{AA}(q^2) q^\mu q^\nu] = \quad (3.3.6)$$

$$= \Pi_A(q^2) [q^2 \delta^{\mu\nu} - q^\mu q^\nu]$$

$$\Gamma_e^\mu = (V_L P_L + V_R P_R) \gamma^\mu \quad (3.3.7)$$

$$\Gamma_f^\mu = \frac{g^2}{16\pi^2} \left(-\frac{1}{cs} \right) \frac{A_{w^0 A}(0)}{M_{w^0}^2} \gamma^\mu [a_e^L P_L + a_e^R P_R].$$

$$\tilde{\Pi}_{w^0 A}^{\mu\nu}(q) = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{w^0 A}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{w^0 A}(q^2) q^\mu q^\nu]. \quad (3.3.8)$$

A kontratagok járuléka

$$\Gamma_g^\mu = \frac{i}{gs} [(s^3 \delta g - c^3 \delta g')(-1) \gamma^\mu + (c \delta g' + s \delta g) \gamma^\mu (a_e^L P_L + a_e^R P_R)] \quad (3.3.9)$$

$$\Gamma_h^\mu = -\frac{i}{gs} (c \delta g' + s \delta g) \gamma^\mu (a_e^L P_L + a_e^R P_R) \quad (3.3.10)$$

$$\Gamma_{g+h}^\mu = -\frac{i}{gs} (s^3 \delta g - c^3 \delta g') \gamma^\mu \equiv -i \frac{\delta e}{e} \gamma^\mu \quad (3.3.11)$$

$$\delta e \equiv s^3 \delta g - c^3 \delta g'.$$

Látjuk, hogy a $\delta M_{w^0 A}^2 W_\mu^0 A^\mu$ kontratag kiejtette a $J_{w^0}^\mu A_\mu$ kontratagot.

Összeadva a járulékokat

$$\Gamma^\mu = \left[1 + \delta Z_L + V_L + \frac{1}{2} \Pi_A(0) - \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{cs} \frac{A_{w^0 A}(0)}{M_{w^0}^2} a_e^R - i \frac{\delta e}{e} \right] P_L \gamma^\mu + \quad (3.3.12)$$

$$+ \left[1 + \delta Z_R + V_R + \frac{1}{2} \Pi_A(0) - \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{cs} \frac{A_{w^0 A}(0)}{M_{w^0}^2} a_e^L - i \frac{\delta e}{e} \right] P_R \gamma^\mu.$$

Ahogy ez egzaktul kiszámítható (C, D függelék):

$$\delta Z_L + V_L = 0 \quad (3.3.13)$$

$$\delta Z_R + V_R = \frac{g^2}{16\pi^2} \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2}. \quad (3.3.14)$$

(A jobbkezes tagokhoz (3.3.14.) csak a w gráfok adnak nem zérus járulékot.) (3.3.13),

(3.3.14) $\frac{m_f}{M}$ minden rendjében igaz, tehát a Higgsek teljes figyelembevételével

l -loop szinten (3.1.17) szerint $a_e^R = s^2$, $a_e^L = s^2 - \frac{1}{2}$. Egy loop szinten könnyű megmutatni, hogy $\tilde{A}_{w^0 A}(0)$ -hoz csak a bozonok és a ghostok adnak járulékot, mivel a fermion járulékok $(q^2 \delta^{\mu\nu} - q^\mu q^\nu)$ -vel arányosak (E függelék).

$$A_{w^0 A}(0) = -2sc M_{w^0}^2 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} \quad (3.3.15)$$

$$\Gamma^\mu = \left[1 + \frac{1}{2} \Pi_A(0) + 2 \frac{g^2 s^2}{16\pi^2} \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} - i \frac{\delta e}{e} \right] \gamma^\mu \quad (3.3.16)$$

$$i \frac{\delta e}{e} = \frac{1}{2} \Pi_A(0) + 2 \frac{g^2 s^2}{16\pi^2} \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2}. \quad (3.3.17)$$

Az E függeléknek megfelelően külön írhatjuk a kvark, lepton és bozon (vektorbozon, Higgs, ghost) loopokból származó járulékokat a sajátenergiákhoz. Ennek megfelelően:

$$\Pi_A(0) \equiv \Pi_A^{(b)}(0) + \Pi_A^{(l)}(0) + \Pi_A^{(q)}(0) \quad (3.3.18)$$

$$\Pi_A^{(b)}(0) = \frac{g^2 s^2}{16\pi^2} \left[3 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{2}{3} \right]. \quad (3.3.19)$$

Ezt visszaírva (3.3.17.)-be kapjuk, hogy

$$i \frac{\delta e}{e} = \frac{1}{2} \Pi_A^{(l)}(0) + \frac{1}{2} \Pi_A^{(q)}(0) + \frac{e^2}{16\pi^2} \left[\frac{7}{2} \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{1}{3} \right]. \quad (3.3.20)$$

Ezzel megkaptuk a 3. kifejezést a δF^2 , δg és $\delta g'$ kontratagokra. Írjuk fel ezeket újra.

$$\text{I. } \delta M_w^2 = -\frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re } A_{ww}(-M_w^2) - \tilde{t}_{ww} \quad (3.3.21)$$

$$\delta M_w^2 = \frac{F^2 \delta g^2 + g^2 \delta F^2}{2}$$

$$\text{II. } \delta M_{w^0}^2 = -\frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re } A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2) - \tilde{t}_{w^0 w^0}$$

$$\delta M_{w^0}^2 = \frac{\delta F^2 (g^2 + g'^2) + F^2 (\delta g^2 + \delta g'^2)}{2} \quad (3.3.22)$$

$$\text{III. } i \frac{\delta e}{e} = \frac{1}{2} \Pi_A^{(l)}(0) + \frac{1}{2} \Pi_A^{(q)}(0) + \frac{e^2}{16\pi^2} \left[\frac{7}{2} \ln \frac{A^2}{M_w^2} + \frac{1}{3} \right]$$

$$\delta e = s^3 \delta g - c^3 \delta g'. \quad (3.3.23)$$

I. és II-ből kaptunk egy-egy összefüggést $\delta M_{w^0 A}^2$ -ra (3.1.11). Ezt III-mal összekombinálva a δg és $\delta g'$ kontratagokra a következő kifejezéseket kapjuk:

$$\delta g = \frac{\delta e}{s} - \frac{ec^2}{2s^3} \cdot \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re} \left[\frac{A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} \right] \quad (3.3.24)$$

$$\delta g' = -\frac{\delta e}{c} - \frac{e}{2c} \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re} \left[\frac{A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} \right]. \quad (3.3.25)$$

Hasonlóképpen kifejezhetnénk δF^2 -t is, de erre a kontratagra nem lesz szükségünk a β -bomlás számolásánál. A kontratagok ismeretében most már nekiállhatunk a μ - és β -bomlás sugárzási korrekcióinak a kiszámításához. Előtte azonban foglaljuk össze a lényegesebb dolgokat a renormálási eljárásunkról.

Használhattuk volna a minimális levonási eljárást, vagyis a kontratagokat úgy lerögzítve, hogy csak a pólus tagokat ejtsék ki. A mi renormálási eljárásunknak éppen az az előnye, hogy a Lagrange függvényekben szereplő renormált paramétereknek közvetlen fizikai jelentésük van ($e=gs$, M_w , M_{w^0}).

A (3.3.23—3.3.25.) képletek alapján nyilvánvaló, hogy a δg , $\delta g'$ és δe kontratagok is mértékinvariánsak és IR végesek. (Az utóbbira ez a tulajdonság természetes, hiszen fizikai amplitúdón keresztül definiáltuk.) Végezetül jegyezzük meg, hogy a kontratagok rögzítésénél a levonás egyaránt történt nagy ($q^2=M_w^2, M_{w^0}^2$) és kis impulzus ($q^2=0$) értéknél.

4. μ -BOMLÁS EGY LOOP RENDBEN

Az előző fejezetben rögzítettük azokat a kontrtagokat, amelyekre szükségünk lesz a β -bomlás számolásánál. Először alkalmazzuk renormálási eljárásunkat a μ -bomlásra [18]. Kiszámítjuk a gyenge-elektromágneses korrekciókat $\sigma(G_F \alpha)$ rendben. Leszámítható egy effektív Lagrange függvény, amelyben a gyenge és a foton korrekciók egy része ($A >$) beolvasztható a Fermi csatolási állandóba, vagyis a nulladrendű folyamat átrenormálásába. Az $A >$ foton korrekciókat úgy kapjuk meg, hogy a foton propagátort szétírjuk a következő alakba.

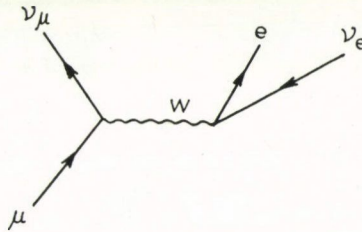
$$\frac{1}{k^2} = \frac{1}{k^2 + M_w^2} + \frac{M_w^2}{k^2 + M_w^2} \frac{1}{k^2} \equiv A > + A < \quad (4.1)$$

Ezt mindazokban a gráfokban megtesszük, ahol a foton korrekciók UV divergenciát tartalmaznak: fermion-sajátenergiáknál és a vertex járulékoknál. (4.1)-ben a jobb oldal első tagja ($A >$) IR véges, de UV divergens. A foton korrekcióknak ezt a részét a gyenge korrekciókkal együtt fogjuk kezelni (a továbbiakban a gyenge korrekciókba ezeket mindig beleértjük). A megmaradt másik tag ($A <$) UV véges járulékot ad. Ezeket a megmaradt foton korrekciókkal együtt (box gráf, bremsstrahlung) kezeljük, amelyek megadják a hagyományos, önmagukban mértékinvariáns, foton korrekciókat $A_{\text{cutoff}} = M_w$ helyettesítéssel. Ez utóbbiak természetesen nem tartalmaznak már UV divergenciákat. Egy későbbi fejezetben majd részletesen foglalkozunk velük a β -bomlás esetében.

Legalacsonyabb rendben a μ -bomlás amplitúdója:

$$\begin{aligned} M_0 &= (2\pi)^4 i \left[-\frac{g^2}{2} \bar{u}_{v_\mu} \gamma_e P_L u_\mu \frac{1}{q^2 + M_w^2} \bar{u}_e \gamma^e P_L v_{ve} \right] \approx \\ &\approx -(2\pi)^4 i \frac{G_F}{\sqrt{2}} [\bar{u}_{v_\mu} \gamma_e (1 + \gamma_5) u_\mu] [\bar{u}_e \gamma^e (1 + \gamma_5) v_{ve}]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

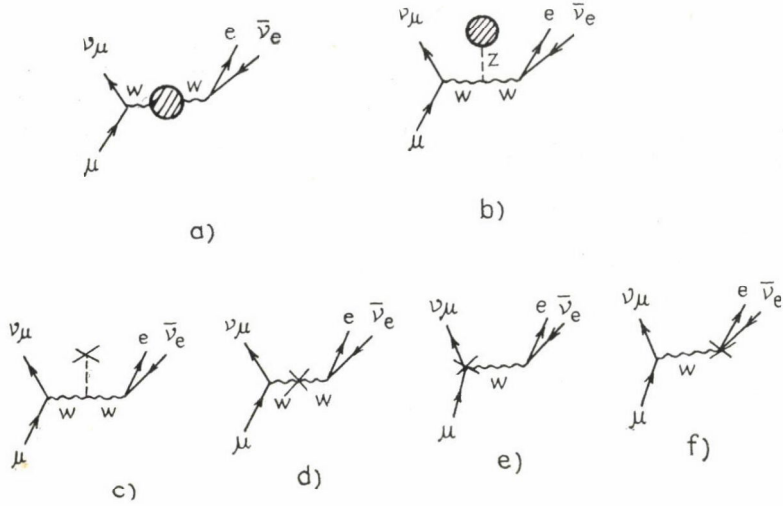
$$\frac{G_F}{\sqrt{2}} \equiv \frac{g^2}{8M_w^2}.$$



A gyenge korrekciók a következőképpen módosítják ezt az amplitúdót:

$$M^{r.c.} = M_0(1 + \Delta) \quad \Delta = \Delta_w + \Delta_{c.t.} + \Delta_v + \Delta_B. \quad (4.3)$$

Itt Δ_w a w sajátenergiás és tadpole járulékok, $\Delta_{c.t.}$ a kontrtag járulékok, Δ_v a vertex és fermion sajátenergiás járulékok, Δ_B pedig a box gráfok járuléka. A továbbiakban ezeket a mennyiségeket fogjuk kiszámítani.

I. w sajátenergia, tadpole és kontratag járulékok

$$\Delta_w^a = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{A_{ww}(q^2)}{M_w^2} \quad (4.4)$$

(3.1.8a)-ból a sajátenergiához a $B_{ww}(q^2)q^\mu q^\nu$ tag dimenziós okok miatt biztosan $O\left(G_F \frac{m^2}{M_w^2}\right)$ járulékot ad, ahol m lepton vagy hadron tömeg. Ez viszont $O(G_F^2)$ nagyságrendű, amit mindig elhanyagolunk.

(4.4.)-ből $A_{ww}(q^2)$ a következőképpen írható:

$$A_{ww}(q^2) = A_{ww}(0) \left[1 + O\left(\frac{q^2}{M_w^2}\right) \right]. \quad (4.5)$$

Könnyű megmutatni, hogy

$$A_{ww}^{(l,q)}(0) \approx O\left(\alpha \frac{m^2}{M_w^2}\right). \quad (4.6)$$

Vagyis csak a vektorbozon, Higgs és ghost loopokat ($A_{ww}^{(b)}(0)$) kell figyelembe venni, ezekből is csak az M_w -el arányos tagokat. (A β -bomlás szempontjából ezt és még sok más korrekciót nem kellene kiszámítanunk mert univerzálisak, vagyis megegyeznek a μ -bomlás megfelelő korrekcióival. Így amikor a μ -bomlás Fermi csatolási állandóját vezetjük be a β -bomlásnál, ezek a korrekciók mind kiejtik egymást.)

$$\Delta_w^b + \Delta_{c.t.}^c = \frac{\tilde{t}_{ww}}{M_w^2} \quad (4.7)$$

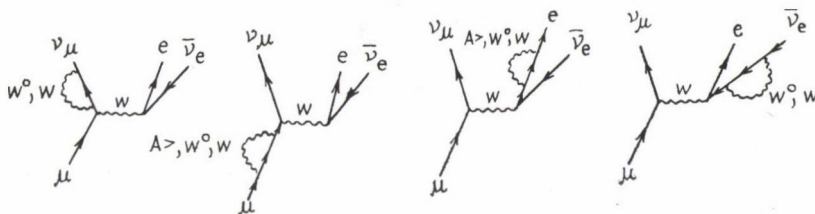
$$\Delta_{c.t.}^d = \left[-\frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re } A_{ww}(-M_w^2) - \tilde{t}_{ww} \right] \frac{1}{M_w^2} \quad (4.8)$$

$$\Delta_{c.t.}^e + \Delta_{c.t.}^f = -2 \frac{\delta g}{g} = 2 \left[-\frac{\delta e}{e} + \frac{c^2}{2s^2} \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re} \left\{ \frac{A_{ww^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} \right\} \right]. \quad (4.9)$$

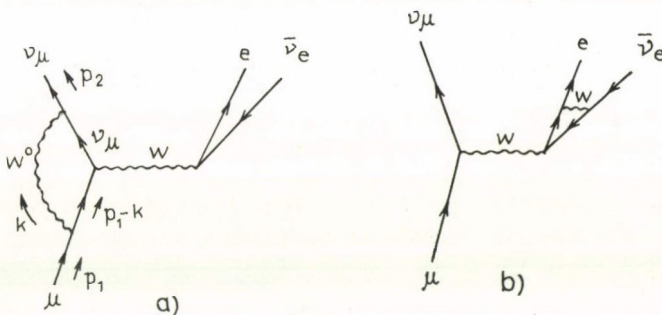
Ezeket a kifejezéseket egyszerű megkapni a (3.3.21—3.3.25) képletek felhasználásával. Összeadva a fenti járulékokat:

$$\begin{aligned} A_w + A_{c.t.} = & \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{A_{ww}(q^2) - \text{Re } A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} - 2 \frac{\delta e}{e} + \right. \\ & \left. + \frac{c^2}{s^2} \frac{g^2}{16\pi^2} \text{Re} \left[\frac{A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} \right] \right]. \end{aligned} \quad (4.10)$$

II. Vertex és fermion sajátenergiás járulékok.



$$\Delta_v^{\text{selfenergy}} = \delta Z_R^v + \frac{1}{2} \delta Z_R^\mu + \frac{1}{2} \delta Z_R^e$$



Számítsuk ki az a gráf járulékát

$$M_a^{\text{r.c.}} = (2\pi)^4 i \left[-\frac{g^2}{2} \bar{u}_{v\mu}(p_2) V_a^e u_\mu(p_1) \frac{1}{q^2 + M_w^2} \bar{u}_e \gamma_e P_{Lv_{ve}} \right] \quad (4.12)$$

$$(4.13)$$

$$V_a^e = \frac{g^2}{16\pi^2} \left(-\frac{1}{c^2} \right) \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{\gamma^\lambda (a_v^L P_L + a_v^R P_R) i(k-p_2) \gamma^e P_L [i(k-p_1) + m_\mu] \gamma^\lambda (a_\mu^L P_L + a_\mu^R P_R)}{[k^2 + M_{w^0}^2] [(k-p_1)^2 + m_\mu^2] [(k-p_1+q)^2]}$$

Kis k tartományban az integrál véges és $O\left(\frac{1}{M_{w^0}}\right)$ rendű. Tehát ez V_x^p -hoz $O(G_F^2)$ járulékot adna. Elegendő tehát a nagy k tartományt vizsgálni. Ebben az esetben a (4.13.) a következő kifejezésre egyszerűsödik. (A számlálóban csak a k -ban kvadra-

tikus tagok adnak $O(G_F \alpha)$ járulékot.)

$$V_a^e \approx \frac{g^2}{16\pi^2} \left[-\frac{1}{c^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{(2-n) [k^2 \gamma^e - 2k k^e] [a_L^v a_L^\mu P_L + a_R^v a_R^\mu P_R]}{k^n (k^2 + M_{w_0}^2)} \right]. \quad (4.14)$$

Felhasználva a B függelék képleteit

$$V_a^e \approx \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{a_L^v a_L^\mu}{c^2} \left(\ln \frac{\Lambda^2}{M_{w_0}^2} - \frac{1}{2} \right) \gamma^e P_L \quad (4.15)$$

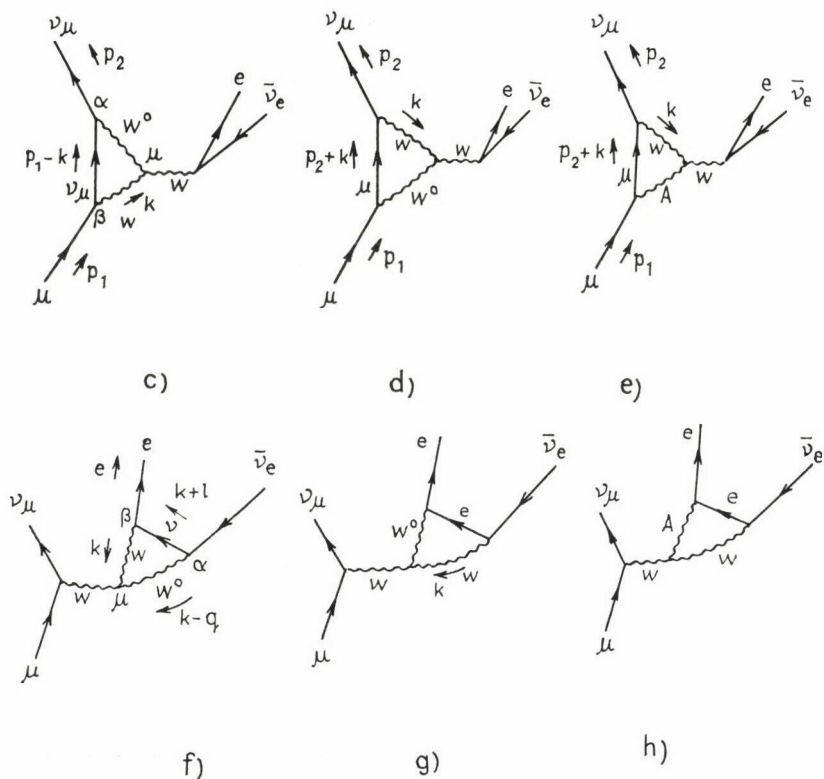
$$a_L^v a_L^\mu = \frac{2s^2 - 1}{4}$$

$$\Delta_v^a = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{a_L^v a_L^\mu}{c^2} \left(\ln \frac{\Lambda^2}{M_{w_0}^2} - \frac{1}{2} \right). \quad (4.16)$$

Számolhattunk volna úgy is, hogy előbb (4.13.)-at kifejezzük a skalár 3-pont függvényekkel, majd ezeket értékeltük volna ki a megfelelő rendig. Hasonlóan kiértékelhető a b gráf is

$$\Delta_v^b = \Delta_v^a. \quad (4.17)$$

A hátralevő vertexgráfok a következők:



ahol

$$V_c^e = -i \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{V^{e\alpha\beta}(q, k) T_{\alpha\beta}^{(1)}(k)}{[k^2 + M_w^2][(k-q)^2 + M_{w0}^2]}, \quad (4.18)$$

$$T_{\alpha\beta}^{(1)}(k) = \frac{\gamma_\alpha i(k-p_1)\gamma_\beta}{(k-p_1)^2} a_L^v P_L \quad (4.19)$$

$$V^{e\alpha\beta}(q, k) = \delta_{e\alpha}(k-2q)_\beta + \delta_{\alpha\beta}(q-2k)_e + \delta_{\beta e}(k+q)_\alpha \quad (4.20)$$

$$V_d^e = -i \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{V^{e\beta\alpha}(q, k) T_{\alpha\beta}^{(2)}(k)}{[k^2 + M_w^2][(k-q)^2 + M_{w0}^2]} \quad (4.21)$$

$$T_{\alpha\beta}^{(2)} = \frac{\gamma_\alpha P_L [-i(p_2+k) + m_\mu] \gamma_\beta (a_\mu^L P_L + a_\mu^\beta P_R)}{(p_2+k)^2 + m_\mu^2} \quad (4.22)$$

$$V_e^e = i s^2 \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{V^{e\beta\alpha}(q, k) T_{\alpha\beta}^{(3)}(k)}{[k^2 + M_w^2][k-q]^2} \quad (4.23)$$

$$T_{\alpha\beta}^{(3)} = \frac{\gamma_\alpha P_L [-i(p_2+k) + m_\mu] \gamma_\beta}{(p_2+k)^2 + m_\mu^2}. \quad (4.24)$$

Hasonlóan járhatunk el, mint az a gráfnál. Ahogy ezt már korábban említettük a Higgseket tartalmazó gráfokat mind elhagyjuk, mivel ezek mindig $O(G_F^2)$ járulékot adnak.

$$V_c^e \approx \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{2k^2 \gamma^e - 2(2-n)kk^e}{[k^2 + M_w^2][k^2 + M_{w0}^2]k^2} P_L \quad (4.25)$$

$$V_d^e \approx \frac{g^2}{16\pi^2} \left(\frac{1}{2} - s^2 \right) \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{2k^2 \gamma^e - 2(2-n)kk^e}{[k^2 + M_w^2][k^2 + M_{w0}^2]k^2} P_L \quad (4.26)$$

$$V_e^e \approx \frac{g^2}{16\pi^2} s^2 \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{2k^2 \gamma^e - 2(2-n)kk^e}{[k^2 + M_w^2]k^4} P_L \quad (4.27)$$

$$\Delta_v^c = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \left[3 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{5}{2} + 3 \frac{\ln c^2}{1-c^2} \right] \quad (4.28)$$

$$\Delta_v^d = \frac{g^2}{16\pi^2} \left(\frac{1}{2} - s^2 \right) \left[3 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{5}{2} + 3 \frac{\ln c^2}{1-c^2} \right] \quad (4.29)$$

$$\Delta_v^e = \frac{g^2}{16\pi^2} s^2 \left[3 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{5}{2} \right]. \quad (4.30)$$

Az f , g és h gráfok járuléka:

$$M^{r.c.} = (2\pi)^4 i \left[-\frac{g^2}{2} (\bar{u}_{\nu\mu} \gamma^e P_L u_\mu) \frac{1}{q^2 + M_w^2} (\bar{u}_e V_e \nu_{ve}) \right]. \quad (4.31)$$

Ezekben az esetekben a kifejezések megegyeznek a c , d és e gráfok megfelelő kifejezésével, ha $k \leftrightarrow -k$ helyettesítést végzünk.

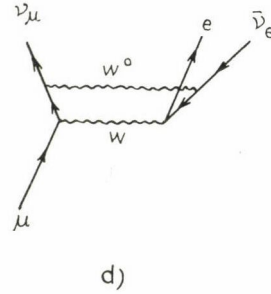
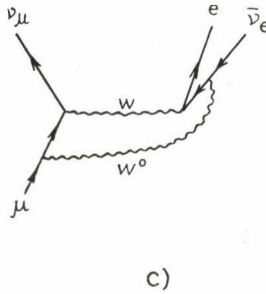
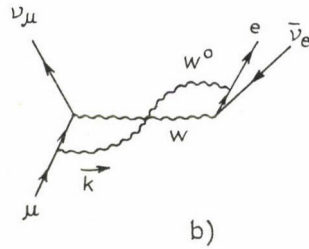
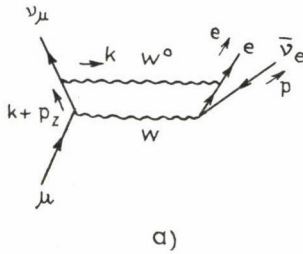
$$\Delta_v^f = \Delta_v^c, \quad \Delta_v^g = \Delta_v^d, \quad \Delta_v^h = \Delta_v^e. \quad (4.32)$$

Összeadva végezetül a vertex és fermion sajátenergiás gráfok járulékait a következőt kapjuk:

$$\Delta_v = \Delta_v^{\text{selfenergy}} + \Delta_v^a + \Delta_v^b + \Delta_v^c + \Delta_v^d + \Delta_v^e + \Delta_v^f + \Delta_v^g + \Delta_v^h \quad (4.33)$$

$$\Delta_v = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[4 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + 6 + \frac{\ln c^2}{s^2} (6c^2 - c^2 s^2) \right]. \quad (4.34)$$

III. Box gráf járulékok



$$M_{a+b}^{r.c.} = (2\pi)^4 i \left(-\frac{g^2}{2} \right) \left(-\frac{1}{c^2} \right) \frac{g^2}{16\pi^2} \times \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} & \times \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{T^{\mu q}(k)}{[k^2 + M_{w^0}^2][(k-q)^2 + M_w^2][(k-l)^2 + m_e^2]} \\ & T^{\mu q}(k) = \bar{u}_{v_\mu} \left\{ \gamma^q (a_v^L P_L + a_v^R P_R) \frac{-i(k+p_2)}{(k+p_2)^2} \gamma^\mu P_L + \gamma^\mu P_L \frac{-i(p_1-k) + m_\mu}{(p_1-k)^2 + m_\mu^2} \right. \\ & \quad \left. \times \gamma^q (a_\mu^L P_L + a_\mu^R P_R) \right\} u_\mu. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Itt is csak a nagy k tartomány érdekes. Ekkor a számlálóba $k=q=m_\mu=0$ írható. (Ezek a tagok is $O(G_F^2)$ rendű járulékot adnának.) Ezek után (4.35) a következő ki-

fejezésre egyszerűsödik:

$$M_{a+b}^{r.c.} = (2\pi)^4 i \frac{g^2}{2c^2} \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{T^{\mu q}(k) [\bar{u}_e \gamma^q \gamma^\sigma \gamma^\mu P_L v_e]}{[k^2 + M_{w^0}^2][k^2 + M_w^2]k^2} i k_\sigma a_e^L \quad (4.37)$$

$$T^{\mu q}(k) \approx \frac{-ik_\lambda}{k^2} \bar{u}_{v_\mu} [\gamma^q \gamma^\lambda \gamma^\mu a_v^L - \gamma^\mu \gamma^\lambda \gamma^q a_\mu^L] P_L u_\mu. \quad (4.38)$$

A három mátrix szorzatát átírhatjuk.

$$\gamma^q \gamma^\sigma \gamma^\lambda = \delta^{q\sigma} \gamma^\lambda - \delta^{q\lambda} \gamma^\sigma + \delta^{\sigma\lambda} \gamma^q + \epsilon^{q\sigma\lambda\alpha} \gamma^\alpha \gamma^5$$

így

$$T^{\mu q}(k) = \frac{-ik_\lambda}{k^2} \bar{u}_{v_\mu} \gamma^\beta P_L u_\mu [c^2 (\delta^{q\lambda} \delta^{\mu\beta} - \delta^{q\mu} \delta^{\lambda\beta} + \delta^{\lambda\mu} \delta^{q\beta} + 2s^2 \bar{Q} \epsilon^{\mu q \lambda \beta})] \quad (4.39)$$

ahol

$$\bar{Q} = \frac{1}{2} (e_{v_\mu} + e_\mu) = \frac{a_{v_\mu}^L + a_\mu^L}{-2s^2} \quad (4.40)$$

vagyis egy gyenge fermion izodoublet töltésátlaga. Egyszerű átalakítások után a következőt kapjuk:

$$\Delta_B^a + \Delta_B^b = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{(1-2s^2)}{c^2} \frac{c^2}{2s^2} \ln \frac{1}{c^2} \left[\frac{5}{2} s^2 - 3s^2 \bar{Q} \right]. \quad (4.41)$$

A c és d gráfokra a megfelelő kifejezések:

(4.42)

$$M_{c+d}^{r.c.} = (2\pi)^4 i \frac{g^2}{2c^2} \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{T^{\mu q}(k) [\bar{u}_e \gamma^\mu P_L (-i(k-p)) \gamma^q (a_v^L P_L + a_v^R P_R) v_e]}{[k^2 + M_{w^0}^2][(k-q)^2 + M_w^2][k-p]^2}$$

$$M_{c+d}^{r.c.} = (2\pi)^4 i \frac{g^2}{2c^2} \frac{g^2}{16\pi^2} \int \frac{d^n k}{i\pi^2} \frac{-ik_\sigma a_v^L T^{\mu q}(k) [\bar{u}_e \gamma^\mu \gamma^\sigma \gamma^q P_L v_e]}{[k^2 + M_{w^0}^2][k^2 + M_w^2]k^2} \quad (4.43)$$

$$\Delta_B^c + \Delta_B^d = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{c^2}{2s^2} \ln \frac{1}{c^2} \left[\frac{5}{2} c^n + 3\bar{Q}s^4 \right]. \quad (4.44)$$

Összeadva a box járulékokat a következőt kapjuk:

$$\Delta_B \equiv \Delta_B^a + \Delta_B^b + \Delta_B^c + \Delta_B^d \quad (4.45)$$

$$\Delta_B = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{c^2}{2} \ln \frac{1}{c^2} \left[5 \frac{c^2}{s^2} - 3 \frac{s^2}{c^2} \right]. \quad (4.46)$$

Összeadva a (4.10), (4.34) és (4.46) kifejezéseket a μ -bomlás gyenge korrekcióira (beleértve az $A >$ foton korrekciókat) azt kapjuk, hogy

$$M^{r.c.} = M_0(1 + \Delta)$$

$$\Delta = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{A_{ww}(q^2) - \text{Re } A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} + \frac{c^2}{s^2} \text{Re} \left\{ \frac{A_{w^0 w^0}(-M_{w^0}^2)}{M_{w^0}^2} - \frac{A_{ww}(-M_w^2)}{M_w^2} \right\} \right] - 2 \frac{\delta e}{e} + \frac{g^2}{16\pi^2} \left[4 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + 6 + \frac{\ln c^2}{s^2} \left(\frac{7}{2} - 2s^2 \right) \right]. \quad (4.47)$$

Ez megegyezik Sirlin [18] (34b) képletével. Nyilvánvaló, hogy a gyenge korrekciók járuléka beolvaszthatók a csatolási állandó átdefinálásába.

$$\hat{g}^2 \equiv g^2(1 + \Delta). \quad (4.48)$$

Így az összes nehéz részecske járuléka kifejezhető egy effektív Lagrange függvénnyel

$$L_{\text{eff}} = -\frac{\hat{G}_F}{\sqrt{2}} [\bar{u}_{\nu_\mu} \gamma^\mu (1 + \gamma_5) u_\mu] [\bar{u}_e \gamma_\mu (1 + \gamma_5) v_{\nu_e}], \quad (4.49)$$

ahol

$$\frac{\hat{G}_F}{\sqrt{2}} = \frac{\hat{g}^2}{8M_w^2} = \frac{G_F}{\sqrt{2}} (1 + \Delta) = \frac{g^2(1 + \Delta)}{8M_w^2}. \quad (4.50)$$

\hat{G}_F -et a μ élettartamának a méréséből kaphatjuk meg [18].

$$\frac{1}{\tau_\mu} = \frac{\hat{G}_F m_\mu^5}{192\pi^3} \left(1 - \frac{8m_e^2}{m_\mu^2} \right) \left[1 + \frac{3}{5} \frac{m_\mu^2}{M_w^2} + \frac{\alpha}{2\pi} \left(\frac{25}{4} - \pi^2 \right) \right]. \quad (4.51)$$

A fenti képletben az α -val arányos tagok a hagyományos foton korrekciókból származnak, vagyis amit számolásainkból kihagytunk. ($A <$, foton box). A (4.51) képletben τ_μ a gyenge és elektromágneses korrekciók ($G_F \alpha$) rendjében van megadva. A kísérleti értékből a következő számot kapjuk \hat{G}_F -re

$$\hat{G}_F = (1,16632 \pm 0,00002) \times 10^{-5} \text{ GeV}^{-2}. \quad (4.52)$$

Renormálási eljárásunk következménye, hogy mind G_F , mind g^2 és Δ UV és IR véges, továbbá $\alpha = (e^2/4\pi)$ éppen a finomszerkezeti állandó.

A μ -bomlás 1 loop számolására azért volt szükségünk, mert majd a β -bomlásnál a gyenge csatolási állandó helyett be tudjuk hozni (4.50) felhasználásával a \hat{G}_F -et, amely kísérletileg egy pontosan meghatározott szám.

5. β -BOMLÁS

Ebben a fejezetben a hyperonok β -bomlásához számoljuk ki a sugárzási korrekciókat. Az alapfolyamat egy töltött (semleges) hyperon bomlása egy semleges (töltött) hyperonra, egy leptonra és egy antineutrínóra. A μ -bomláshoz hasonlóan itt is 2 részre osztjuk a korrekciókat. Először a gyenge korrekciókat számoljuk ki az 5.1. fejezetben. Ebben az esetben, mint ahogy ezt részletesen látni fogjuk, az erős kölcsönhatás jelenléte nem okoz nehézségeket. A box gráfokon kívül a járulékok univerzálisak (meg egyeznek a μ -bomlás gyenge korrekcióival), ezért csak az utóbbiak adnak járulékot, mivel a 4. fejezetben renormált G_F Fermi állandóval fejezzük ki a gyenge csatolási állandót. Az UV divergenciákat a kontratagok kiejtik a μ -bomláshoz hasonlóan.

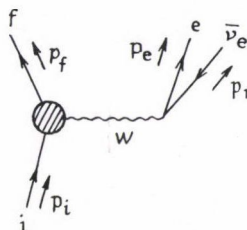
A korrekciók másikat a hagyományos foton járulékokat az 5.2. fejezetben tárgyaljuk. Ezeket az irodalomban már korábban részletesen tanulmányozták [14–17]. Ebben az esetben szokásos a korrekciók felbontása modell-függő és modell-független járulékokra. Az előbbieknél az erős kölcsönhatás jelenléte okoz nehézségeket, azért ezekre általában nagyságrendi becslés végezhető és megmutatható, hogy járulékok beolvasztható a formfaktorokba. Az utóbbi rész számolható függetlenül az erős kölcsönhatástól.

Mi pontszerű nukleon modellben számoljuk ki a foton korrekciókat. Ezek teljes egészében tartalmazzák a korrekciók modell-független részét. Ebben a közelítésben a valódi (bremsstrahlung) foton korrekciókat is kiértékeljük nem korlátozódva csak a soft járulékokra. Ezek figyelembevétele szükséges az IR divergenciák kiejtése miatt is.

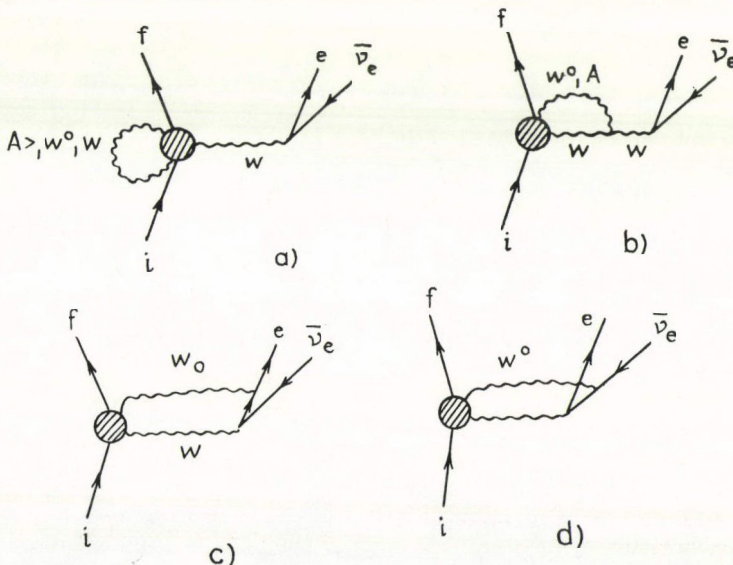
5.1. Gyenge korrekciók

Az alapfolyamat amplitúdója:

$$M_0 = -(2\pi)^4 i \frac{g^2}{2} \langle f | J^\mu(0) | i \rangle \frac{1}{q^2 + M_w^2} (\bar{u} e \gamma_\mu P_L v). \quad (5.1.1)$$



A hadronvertexnél jelen van az erős kölcsönhatás, ezt (5.1.1)-ben a hadron állapotok közt vett gyenge áram fejezi ki. A mátrixelemet a legáltalánosabb formában hat formfaktoral lehet kifejezni. Ezeket a gyenge formfaktorokat méri ki a kísérleti fizikusok. A 6 komplex formfaktor számát lényegesen megszoríthatjuk, ha az időtükrözést, CVC-t, G -paritás megmaradást és a Cabibbo hipotézist felhasználjuk. A gyenge egy-loop korrekciók a következők: (A többi, lepton vertex, W -sajátenergiás és lepton sajátenergiás korrekciók, azonosak a μ -bomlás megfelelő korrekcióival).



A fenti egy-loop integrálokban a propagátorokon kívül az integrandusokban hadron végállapotokon vett két és három áram mátrix-elemek vannak. Ezek kiértékelésének módját *Sirlin* részletesen leírta [7]. Megmutatható, hogy a loop integrálokban csak a nagy impulzusú tartomány ad $O(G_F\alpha)$ rendű járulékokat. Itt viszont alkalmazható az operátor szorzat kifejtés (OPE) a mátrix-elemek kiszámításához. Az OPE első tagja a szabad kvark modell alkalmazásának felel meg, a magasabb rendű tagok viszont elhagyhatók ($O(G_F^2)$ járulékok). *Ezért számolhatunk a szabad kvark modell keretén belül.* Megjegyezzük, hogy már a μ -bomlásnál is tapasztaltuk, hogy az integrálokban csak a nagy loop-impulzusú tartományok adtak $O(G_F\alpha)$ rendű korrekciókat. (4.3)-hoz hasonlóan a korrekciók a következő alakban írhatók fel.

$$M^{\text{r.c.}} = M_0(1 + \Delta)$$

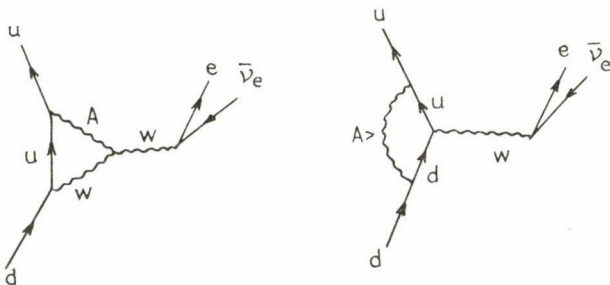
$$\Delta = \Delta_w + \Delta_{\text{c.t.}} + \Delta_v + \Delta_B \quad (5.1.2)$$

Δ_w és $\Delta_{\text{c.t.}}$ megegyezik (4.10.)-el.

Vertex és sajátenergiás betétek:

$$\Delta_v^{\text{selfenergy}} = \frac{1}{2} (\delta Z_R^u + \delta Z_R^d + \delta Z_R^e + \delta Z_R^{\bar{e}}). \quad (5.1.3)$$

A vertex gráfok az alábbi két gráfban különböznek a μ -bomláséitól, mivel a müon neutrínót egy töltött kvark váltja fel.



Az a és b gráfok járulékai külön az A , W és W^0 loopokra a következők:

$$\Delta_v^{A,w} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{1}{2} (1 + s^2(e_u - e_d)^2) \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{A^2}{M_w^2} \right) + s^2(e_u - e_d) \left(3 \ln \frac{A^2}{M_w^2} + \frac{5}{2} \right) \right] \quad (5.1.4)$$

$$\Delta_v^{w^0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{(a_u^L - a_d^L)^2}{2c^2} \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{A^2}{M_w^2} - \ln c^2 \right) + (a_u^L + a_d^L) \left(3 \ln \frac{A^2}{M_w^2} + \frac{5}{2} + 3 \frac{\ln c^2}{s^2} \right) \right]. \quad (5.1.5)$$

Mivel

$$e_u - e_d = e_v - e_e = 1 \quad (5.1.6)$$

$$a_u^L - a_d^L = 1 - s^2(e_u - e_d) = c^2 \quad (5.1.7)$$

így a vertex korrekciók *univerzálisak*, vagyis ugyanazok, mint a μ -bomlás esetén.

A c és d box gráfok járulékait megkapjuk, ha (4.41)-be és (4.44)-be behelyettesítjük a megfelelő \bar{Q} értéket

$$\bar{Q} = \frac{1}{2} (e_u + e_d) = \frac{1}{6}. \quad (5.1.8)$$

Tehát a β -bomlás gyenge korrekciónál az egyedüli eltérés a box gráfokból származik. Végeredményben a következőt kapjuk a β -bomlás gyenge korrekcióira:

$$M^{r.c.} = M_0 \left[1 + \Delta^{(\mu)} - \frac{3}{2} \frac{g^2 s^2}{16\pi^2} \ln c^2(1+2\bar{Q}) \right], \quad (5.1.9)$$

ahol Δ^μ a (4.47)-ben megadott gyenge korrekciók a μ -bomláshoz. (4.50)-nek megfelelően

$$\frac{G_F}{\sqrt{2}} (1 + \Delta^{(\mu)}) = \frac{\hat{G}_F}{\sqrt{2}} \quad (5.1.10)$$

$$M^{r.c.} = M_0 \left[1 - \frac{3}{2} \frac{\alpha}{4\pi} \ln c^2(1+2\bar{Q}) \right] \quad \alpha = \frac{(gs)^2}{4\pi} \quad (5.1.11)$$

ahol M_0 már a mért \hat{G}_F Fermi csatolási állandóval van kifejezve. Ha behelyettesítünk (5.1.11)-be, akkor a relatív gyenge korrekciókra a következő értéket kapjuk:

$$\Delta_{\text{weak}} = 0,03\%, \quad \cos^2 \theta = 0,77 \quad (5.1.12)$$

$$\bar{Q} = \frac{1}{6}.$$

Ez a mennyiség elhanyagolhatóan kicsi lesz a néhány százalékos foton korrekciók mellett. (5.1.11)-ből az is látszik, hogy a gyenge korrekciók járuléka konstans, így a fizikai mennyiségek (form faktorok) hányadosaiból kiesik.

5.2. Elektromágneses korrekciók

Ebben a fejezetben a virtuális és valódi (bremsstrahlung) foton korrekciókat számoljuk ki pontszerű nukleonokat tételezve fel. Az utóbbiak tárgyalása két okból is szükséges. Egyrészt ezek ejtik ki a virtuális foton járulékok IR divergenciáit, (λ véges foton tömeggel regularizálunk), másrészt a kísérletben nincsenek azok a folyamatok kizárva, amikor egy foton is van a végállapotban. Így ki kell integrálni a foton-impulzus fázisterére is.

Két folyamat-típussal fogunk foglalkozni:

- I. Végállapotbeli hadron töltött ($\Lambda^0 \rightarrow p e \bar{\nu}_e$). Ekkor a bomló barion polarizált.
- II. Bomló barion töltött ($\Sigma^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}_e$, $\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}_e$, $\Xi^- \rightarrow \Sigma^0 e \bar{\nu}_e$, $\Sigma^- \rightarrow n e \bar{\nu}_e$).

Ekkor vannak olyan mérések, amikor a végállapotbeli barion polarizált.

Ebben a fejezetben a korábbiaktól eltérően a szokásos Minkowski metrikával fogunk dolgozni. (Bjorken, Drell konvekció [25]. A két metrika kapcsolata a F függvényben található.) Ezenkívül olyan alakban fogjuk megadni a korrekciókat, hogy könnyen össze lehessen hasonlítani Linke [24] formuláival.

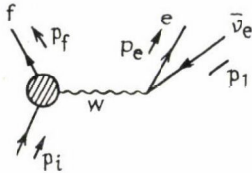
Az alapfolyamat amplitúdója a következő:

$$M_0 = \frac{G_F}{\sqrt{2}} [\bar{u}_f H_\mu u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v_\nu] \quad (5.2.1)$$

$$(5.2.2)$$

$$H^\mu = F_1(q^2)\gamma^\mu + F_2(q^2)\frac{p_i^\mu}{m_i} + F_3(q^2)\frac{q^\mu}{m_i} + G_1(q^2)\gamma^\mu\gamma_5 + G_2(q^2)\gamma_5\frac{p_i^\mu}{m_i} + G_3(q^2)\gamma_5\frac{q^\mu}{m_i}$$

ahol a részecskék impulzusai



$$q = p_i - p_f = p_e + p_1.$$

(A számolásaink során a formfaktorokat konstansoknak tételezzük fel. A korábbi mérésekből látszott, hogy a g^2 függésük elég kicsi.)

A hatáskeresztmetszet (a bomló barion nyugalmi rendszerében).

$$d\sigma_0 = \frac{1}{2m_i} \frac{d^3 p_f}{2E_f} \frac{d^3 p_e}{2E_e} \frac{d^3 p_1}{2E_1} \delta^n(p_i - p_e - p_f - p_1) \sum_{\text{spin}} |M_0|^2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^5}. \quad (5.2.3)$$

Mi a továbbiakban mindig a végállapotbeli barion és elektron energia szerinti Dalitz-eloszlásra leszünk kíváncsiak, amelyet úgy kapunk meg, hogy (5.2.3)-ban kiintegrálunk a maradék változókra.

$$\frac{\partial^2 \sigma_0(E_e, E_f)}{\partial E_e \partial E_f} = \frac{\partial^2 \sigma_0(x, y)}{R m_i^2 \partial x \partial y} = \frac{1}{64\pi^3 m_i} \sum_{s_e, s_1} |M_0|^2 \quad (5.2.4)$$

$$R = \frac{E_e^{\max}}{m_i} = \frac{m_i^2 - m_f^2 + m_e^2}{2m_i^2}; \quad \varepsilon = \frac{m_e^2}{m_i^2}; \quad \eta = \frac{m_f}{m_i} = \sqrt{1 - 2R + \varepsilon} \quad (5.2.5)$$

$$x = \frac{E_e}{E_e^{\max}}; \quad y = \frac{E_f}{m_i}. \quad (5.2.6)$$

A Dalitz-plot határai:

$$\frac{\sqrt{\varepsilon}}{R} \leq x \leq 1, \quad y_0(x) \leq y \leq y_1(x) \quad (5.2.7)$$

$$y_{1/0}(x) = 1 - Rx - \frac{R(1-x)}{1 - Rx \pm \sqrt{R^2 x^2 - \varepsilon}}. \quad (5.2.8)$$

A mátrix-elem négyzete:

$$\begin{aligned} \sum_{s_{e_1} s_1} |M_0|^2 &\equiv \frac{G_F^2}{2} L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} = \\ &= \frac{G_F^2}{2} T_r[2\gamma^\mu (1-\gamma_5) p_1 \gamma^\nu p_e] T_r[H_\mu a_i \bar{H}_\nu a_f] \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

$$a_{i,f} \equiv \frac{1}{2} (1 + \gamma_5 s_{i,f}) (p_{i,f} + m_{i,f}); \quad \bar{H}_\nu \equiv \gamma_0 H_\nu^+ \gamma_0. \quad (5.2.10)$$

Az elektron és neutrino spinjére mindig kiösszegezzük. Ha a barion polarizálatlan, akkor

$$a_i = \frac{1}{2} (p_i + m_i) \quad (5.2.11)$$

ha a végállapotbeli barion polarizálatlan, akkor pedig

$$a_f = (p_f + m_f) \quad (5.2.12)$$

írandó (5.2.9.)-be. További eloszlásokat kaphatunk, ha (5.2.3.)-ban x, Y változókra kiintegrálunk. (Elektron spektrum, hadron spektrum, decay rate.)

A mátrix elem négyzetét a következő alakban is felírhatjuk:

$$L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} = \sum_{i \leq j} f_i f_j F_{ij}^0(x, y) \quad (5.2.14)$$

ahol

$$i, j = 1, \dots, 6$$

$$f_i = G_{i-3} \quad i = 4, 5, 6 \quad (5.2.15)$$

$$f_i = F_i \quad i = 1, 2, 3$$

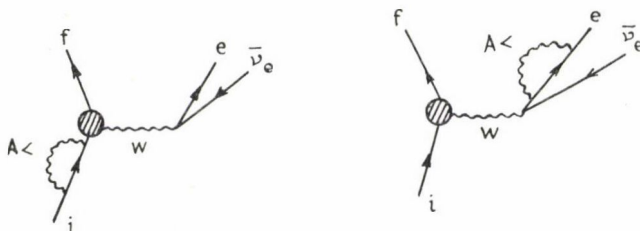
$F_{ij}^0(x, y)$ kinematikai függvényeket (5.2.9) spurjainak elvégzése után kapjuk meg, ha H_μ és H_ν -be a megfelelő form faktor kombinációkat írjuk be. A számolás igen hosszadalmas lenne, különösen polarizált esetben [24], ezért a továbbiakban is ezeket mindig a REDUCE algebrai programmal számoljuk. (A bremsstrahlungok esetén a spurok eredményei még terjedelmesebbek.) Az (5.2.14) alak azért fontos, mert a kísérleti fizikusok mindig ennek a segítségével határozzák meg a formfaktorokat a kísérleti eredményekből, fitteléssel. Ezért a sugárzási korrekcióinkat is a következőképpen adjuk meg:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \sigma^{\text{r.c.}}(x, y)}{R m_i^2 \partial x \partial y} &= \frac{1}{64\pi^3 m_i} \frac{G_F^2}{2} \sum_{i \leq j} f_i f_j F_{ij}(x, y) \\ F_{ij}(x, y) &= F_{ij}^0(x, y) + F_{ij}^{\text{c}}(x, y). \end{aligned} \quad (5.2.16)$$

A) Virtuális foton korrekciók

Először adjuk meg a virtuális foton korrekciók járulékait. Ehhez a következő gráfokat kell kiértékelnünk (most foglalkozunk a $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ típusú folyamatokkal, később a Λ bomlásra is megadjuk a formulákat).

a) barion és lepton sajátenergiák



$$M_{s.e.} = M_0 \left[\frac{1}{2} \delta Z_i^{A<} + \frac{1}{2} \delta Z_e^{A<} \right] \quad (5.2.17)$$

$$\delta Z_i^{A<} = -\frac{\alpha}{4\pi} \left[\ln \frac{M_w^2}{m_i^2} + \frac{9}{2} - 2 \ln \frac{m_i^2}{\lambda^2} \right] \quad (5.2.18)$$

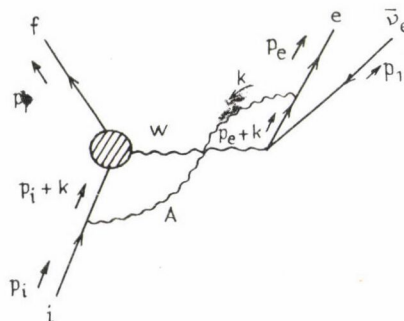
$$\delta Z_e^{A<} = -\frac{\alpha}{4\pi} \left[\ln \frac{M_w^2}{m_e^2} + \frac{9}{2} - 2 \ln \frac{m_e^2}{\lambda^2} \right]. \quad (5.2.19)$$

Ezek a járulékok tehát arányosak az alapfolyamat mátrix-elemével és konstansok. (A Dalitz-plott minden pontjában megegyeznek.) Látjuk, hogy (5.2.18–5.2.19.) IR divergenciákat tartalmaznak. Írjuk ezeket le külön

$$M_{s.e.}^{IR} = \frac{\alpha}{2\pi} \left[\ln \frac{m_i^2}{\lambda^2} + \ln \frac{m_e^2}{\lambda^2} \right] M_0 \quad (5.2.20)$$

$$d\sigma_{s.e.}^{IR} = \frac{\alpha}{2\pi} \left[\ln \frac{m_i^2}{\lambda^2} + \ln \frac{m_e^2}{\lambda^2} \right] d\sigma_0 \quad (5.2.21)$$

b) foton box gráf



$$M_{\text{BOX}} = \frac{-G_F}{\sqrt{2}} M_w^2 \frac{\alpha}{4\pi} \int \frac{d^4 k}{i\pi^2} \frac{\mathcal{M}_{\text{BOX}}(p_i, p_f, p_e, k)}{N} \quad (5.2.22)$$

$$N \equiv [(k+p_e)^2 - m_e^2][(k+q)^2 - M_w^2][(k+p_i)^2 - m_i^2][k^2 - \lambda^2] \quad (5.2.22a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \sigma_{\text{BOX}}(x, y)}{R m_i^2 \partial x \partial y} &= \frac{1}{64\pi^3 m_i} \sum_{\text{spin}} [M_0^+ M_{\text{BOX}} + M_0 M_{\text{BOX}}^+] = \\ &= \frac{1}{64\pi^3 m_i} \sum_{\text{spin}} 2 \operatorname{Re} [M_0^+ M_{\text{BOX}}] \end{aligned} \quad (5.2.23)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\text{BOX}} &= [\bar{u}_f H_v (p_i + k + m_i) \gamma_u u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (p_e + k + m_e) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) v] = \\ &= [\bar{u}_f H_v (k \gamma_\mu + 2 p_{i\mu}) u_i] [\bar{u}_e (\gamma^\mu k + 2 p_e^\mu) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) v] \end{aligned} \quad (5.2.24)$$

(5.2.23.)-ba beírva (5.2.22)-t az integrandus számlálója a következő lesz: (5.2.25)

$$\begin{aligned} M_0^+ \mathcal{M}_{\text{BOX}} &= -\frac{G_F}{\sqrt{2}} \operatorname{Tr}[p_e (\gamma^\mu k + 2 p_e^\mu) \gamma^\nu 2 \cdot (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \operatorname{Tr}[H_v (k \gamma_\mu + 2 p_{i\mu}) a_i \bar{H}_\alpha a_f] \\ M_0^+ \mathcal{M}_{\text{BOX}} &= -\frac{G_F}{\sqrt{2}} [4(p_e p_i) L^{\nu\alpha} H_{\nu\alpha} + 2 L^{\nu\alpha} \operatorname{Tr}[H_v k p_e a_i \bar{H}_\alpha a_f] + \\ &\quad + 2 \operatorname{Tr}[p_e p_i k \gamma^\nu 2 (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] H_{\nu\alpha} + \\ &\quad + \operatorname{Tr}[p_e \gamma^\mu k \gamma^\nu 2 (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \operatorname{Tr}[H_v k \gamma_\mu a_i \bar{H}_\alpha a_f]]. \end{aligned} \quad (5.2.26)$$

Az integrálás részletes kiértékelése a G függelékben található.

$$\begin{aligned} D_{0,\mu,\nu} &= \frac{1}{i\pi^2} \int d^4 k \frac{1; k_\mu; k_\mu k_\nu}{N} \\ D_\mu &= -p_i^\mu D_1 + p_i^\mu (D_3 + D_1) \end{aligned} \quad (5.2.28)$$

$$(5.2.29)$$

$$D_{\mu\nu} = p_{e\mu} p_{e\nu} D_{11} + p_{i\mu} p_{i\nu} \left(D_{11} - D_1 - \frac{1}{2} D_3 \right) + (p_{i\mu} p_{e\nu} + p_{i\nu} p_{e\mu}) \left(\frac{1}{2} D_1 - D_{11} \right) - g_{\mu\nu} D_{44}$$

A D_0, D_1, D_3, D_{11} és D_{44} függvények a függelékben vannak megadva. A fentiek ismeretében (5.2.26)-ot beírva (5.2.22)-be és felhasználva az (5.2.27)–(5.2.29) képleteket (5.2.23)-ra a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} M_0^+ M_{\text{BOX}} &= -\frac{G_F^2}{2} M_w^2 \frac{\alpha}{4\pi} \{ [4 p_e p_i] (D_0 + D_3) + 2 m_i^2 (D_1 + D_3) \} L^{\nu\alpha} H_{\nu\alpha} - \\ &\quad - 2 m_i (D_1 + D_3) L^{\nu\alpha} \operatorname{Tr}[H_v p_e a_i \bar{H}_\alpha a_f] - \\ &\quad - \left(\frac{1}{2} D_1 - D_{11} \right) \operatorname{Tr}[p_e p_i \gamma^\mu \gamma^\nu 2 (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \operatorname{Tr}[H_v \gamma_\mu p_e a_i \bar{H}_\alpha a_f] + \\ &\quad + m_i \left(D_{11} - D_1 - \frac{1}{2} D_3 \right) \operatorname{Tr}[p_e p_i \gamma^\mu \gamma^\nu 2 (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \operatorname{Tr}[H_v \gamma_\mu a_i \bar{H}_\alpha a_f] - \\ &\quad - D_{44} \operatorname{Tr}[p_e \gamma^\mu \gamma^\nu 2 (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \operatorname{Tr}[H_v \gamma_\mu \gamma_\alpha a_i \bar{H}_\alpha a_f] \}. \end{aligned} \quad (5.2.30)$$

A fenti kifejezést numerikusan kiértékelve és összegyűjtve a megfelelő kombinációkat, megkaphatjuk a box gráfból származó sugárzási korrekciókat [(5.2.30)-ban az $O(m_e^2)$ tagokat elhanyagoltuk]:

$$\frac{\partial^2 \sigma_{\text{BOX}}(x, y)}{R m_i^2 \partial x \partial y} = \frac{1}{64\pi^3 m_i} \frac{G_F^2}{2} \sum_{i \equiv j} f_i f_j F_{ij}^{\text{BOX}}(x, y). \quad (5.2.31)$$

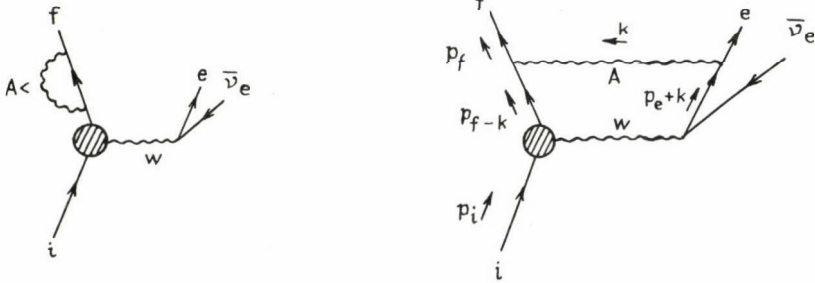
A box gráf esetén is könnyű kiemelni az IR divergens részt, amelyet a D_0 függvény tartalmaz, tehát ebben az esetben is arányos az alapfolyamat hatáskeresztmetszetével.

$$D_0^{\text{IR}} = \frac{1}{M_w^2} \left[\frac{1}{2(p_i - p_e)^2 (y_1 - y_2)} \ln \frac{(y_1 - 1)y_2}{(y_2 - 1)y_1} \ln \frac{(p_i - p_e)^2}{\lambda^2} \right] \quad (5.2.32)$$

$$d\sigma_{\text{BOX}}^{\text{IR}} = -\frac{\alpha}{2\pi} \left[\frac{2p_e p_i}{(p_i - p_e)^2 (y_1 - y_2)} \ln \frac{(y_1 - 1)y_2}{(y_2 - 1)y_1} \ln \frac{(p_i - p_e)^2}{\lambda^2} \right] d\sigma_0, \quad (5.2.33)$$

ahol y_1, y_2 a $(p_i - p_e)^2 y^2 - 2p_i(p_i - p_e)y + p_i^2 = 0$ egyenlet gyökei. Ha a $\Lambda^0 - pe\bar{\nu}_e$ folyamatot tekintjük, akkor csak a baryon sajátenergiás és a foton box gráf lesz különböző.

$$\Lambda^0 \rightarrow pe\bar{\nu}_e$$



Ekkor (5.2.18), (5.2.20) és (5.2.21)-be az $m_i \rightarrow m_f$ helyettesítést kell elvégezni.

A box gráf járuléka a következőképpen módosul:

$$M_{\text{BOX}}^{\Lambda^0} = \frac{G_F}{\sqrt{2}} M_w^2 \frac{\alpha}{4\pi} \int \frac{d^4 k}{i\pi^2} \frac{\mathcal{M}_{\text{BOX}}^{\Lambda^0}(p_i, p_f, p_e, k)}{N^{\Lambda^0}} \quad (5.2.34)$$

$$N^{\Lambda^0} \equiv [(k + p_e)^2 - m_e^2][(k + q)^2 - M_w^2][(k - p_f)^2 - m_f^2][k^2 - \lambda^2] \quad (5.2.34a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\text{BOX}}^{\Lambda^0} &= [\bar{u}_f \gamma_\mu (p_f - k + m_f) H_\nu u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (p_e + k + m_e) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) v] = \\ &= [\bar{u}_f (2p_{f\mu} - \gamma_\mu k) H_\nu u_i] [\bar{u}_e (\gamma^\mu k + 2p_e^\mu) \gamma^\nu (1 - \gamma_5) v] \end{aligned} \quad (5.2.35)$$

$$(5.2.36)$$

$$M_0^+ \mathcal{M}_{\text{BOX}}^{\Lambda^0} = \frac{G_F}{\sqrt{2}} \text{Tr}[p_e (\gamma^\mu k + 2p_e^\mu) \gamma^\nu 2(1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f (-\gamma_\mu k + 2p_{f\mu})]$$

$$\begin{aligned} M_0^+ \mathcal{M}_{\text{BOX}}^{\Lambda^0} &= \frac{G_F}{\sqrt{2}} [4(p_e p_f) L^{\nu\alpha} H_{\nu\alpha} - 2L^{\nu\alpha} \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f p_e k] + \\ &\quad + 2\text{Tr}[p_e p_f k \gamma^\nu 2(1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] H_{\nu\alpha} - \\ &\quad - \text{Tr}[p_e \gamma^\mu k \gamma^\nu 2(1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\alpha] \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f \gamma_\mu k]]. \end{aligned} \quad (5.2.37)$$

A megfelelő D függvények ebben az esetben legyenek $D_0^{A^0}$, $D_1^{A^0}$, $D_3^{A^0}$, $D_{11}^{A^0}$ és $D_{44}^{A^0}$

$$D_{0,\mu,\mu\nu}^{A^0} = \frac{1}{i\pi^2} \int d^4k \frac{1; k_\mu; k_\mu k_\nu}{N^{A^0}} \quad (5.2.38)$$

$$D^{\mu A^0} = -p_e^\mu D_1^{A^0} - p_f^\mu (D_3^{A^0} + D_1^{A^0}) \quad (5.2.39)$$

$$D^{\mu\nu A^0} = p_e^\mu p_e^\nu D_{11}^{A^0} + p_f^\mu p_f^\nu \left(D_{11}^{A^0} - D_1^{A^0} - \frac{1}{2} D_3^{A^0} \right) + (p_f^\mu p_e^\nu + p_e^\mu p_f^\nu) \left(D_{11}^{A^0} - \frac{1}{2} D_1^{A^0} \right) - g^{\mu\nu} D_{44}^{A^0} \quad (5.3.40)$$

$$M_0^+ M_{\text{BOX}}^{A^0} = \frac{G_F^2}{2} M_w^2 \frac{\alpha}{4\pi} \{ [4(p_e p_f) (D_0^{A^0} + D_3^{A^0}) - 2m_f^2 (D_1^{A^0} + D_3^{A^0})] L^{\nu\alpha} H_{\nu\alpha} - \\ - 2m_f (D_1^{A^0} + D_3^{A^0}) L^{\nu\alpha} \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f p_e] + \quad (5.2.41)$$

$$+ \left(\frac{1}{2} D_1^{A^0} - D_{11}^{A^0} \right) \text{Tr}[p_e p_f \gamma^\mu \gamma^\nu 2(1 - \gamma^5) p_1 \gamma^\alpha] \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f p_e \gamma_\mu] -$$

$$- m_f \left(D_{11}^{A^0} - D_1^{A^0} - \frac{1}{2} D_3^{A^0} \right) \text{Tr}[p_e p_f \gamma^\mu \gamma^\nu 2(1 - \gamma^5) p_1 \gamma^\alpha] \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f \gamma_\mu] +$$

$$+ D_{44}^{A^0} \text{Tr}[p_e \gamma^\mu \gamma^\nu 2(1 - \gamma^5) p_1 \gamma^\alpha] \text{Tr}[H_\nu a_i \bar{H}_\alpha a_f \gamma_\mu] \}.$$

Végezetül adjuk még meg ebben az esetben is az IR divergens járulékot.

$$\alpha\sigma_{\text{BOX}, A^0}^{IR} = \frac{\alpha}{2\pi} \left[\frac{2(p_e p_f)}{(p_f + p_e)^2 (y_1 - y_2)} \ln \frac{(y_1 - 1)y_2}{(y_2 - 1)y_1} \ln \frac{(p_f + p_e)^2}{\lambda^2} \right] d\sigma_0 \quad (5.2.42)$$

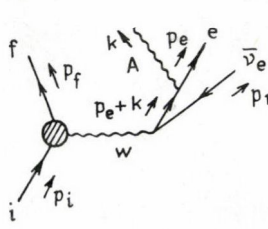
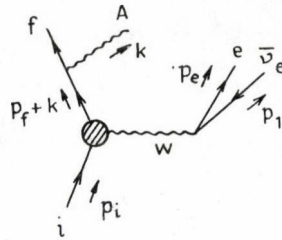
ahol most y_1, y_2 a $(p_f + p_e)^2 y^2 - 2p_f(p_f + p_e)y + p_f^2 = 0$ egyenlet gyökei.

B) Bremsstrahlung korrekciók

Bremsstrahlung folyamatra a differenciális hatáskeresztmetszet a következő alakú (k a foton impulzusa):

$$\alpha\sigma_{BR} = \frac{1}{(2\pi)^8} \frac{1}{2m_i} \frac{d^3 p_f}{2E_f} \frac{d^3 p_e}{2E_e} \frac{d^3 f_1}{2E_1} \frac{d^3 k}{2k_0} \delta^4(p_i - p_e - p_f - p_1 - k) \sum_{\text{spin pol.}} |\mathcal{M}_{BR}|^2 \quad (5.2.43)$$

A mátrixelemet az alábbi gráfokból kell kiszámítani:

I. $\Lambda^0 \rightarrow p e \bar{\nu}_e \gamma$  \mathcal{M}_{BR}^e  \mathcal{M}_{BR}^p

$$\mathcal{M}_{BR} = \mathcal{M}_{BR}^e + \mathcal{M}_{BR}^p \quad (5.2.44)$$

$$\mathcal{M}_{BR}^e = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_e \varepsilon^{*q} [\bar{u}_f H_\mu u_i] [\bar{u}_e \gamma_q (p_e + k + m_e) \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{2(p_e k)} \quad (5.2.45)$$

$$\mathcal{M}_{BR}^p = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_p \varepsilon^{*q} [\bar{u}_f \gamma_q (p_f + k + m_f) H_\mu u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{2(p_f k)} \quad (5.2.46)$$

$$\sum_{s_e, s_1, s_f} |\mathcal{M}_{BR}|^2 = \sum_{s_e, s_1, s_f} \{ |\mathcal{M}_{BR}^e|^2 + 2 \operatorname{Re} [\mathcal{M}_{BR}^{e*} \mathcal{M}_{BR}^p] + |\mathcal{M}_{BR}^p|^2 \} \quad (5.2.47)$$

e_e és e_p az elektron és a proton töltése, ε^q a foton polarizációs vektora. Az (5.2.45) és (5.2.46) képleteket átírhatjuk.

$$\mathcal{M}_{BR}^e = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_e \varepsilon^{*q} [\bar{u}_f H_\mu u_i] [\bar{u}_e (z p_{eq} + \gamma_q k) \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{2(p_e k)} \quad (5.2.48)$$

$$\mathcal{M}_{BR}^p = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_p \varepsilon^{*q} [\bar{u}_f (2 p_{fq} + \gamma_q k) H_\mu u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{2(p_f k)} \quad (5.2.49)$$

(5.2.47) bal oldalára rövid algebrai átalakítások után a következőt kapjuk (Feynman mértékben $\sum_\lambda \varepsilon_\lambda^{*q} \varepsilon_\lambda^q = -g^{qq}$).

$$(5.2.50)$$

$$\sum_{s_e, s_1, s_f} |\mathcal{M}_{BR}^e|^2 = -\frac{G_F^2}{2} \frac{e^2}{(p_e k)^2} [m_e^2 L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} + (m_e^2 - p_e k) \operatorname{Tr} [2 \gamma^\mu (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\nu p] H_{\mu\nu}]$$

$$\begin{aligned} \sum_{s_e, s_1, s_f} |\mathcal{M}_{BR}^p|^2 = & -\frac{G_F^2}{2} \frac{e^2}{(p_f k)^2} [m_f^2 L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} + m_f (p_f k) L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu a_i \bar{H}_\nu] + \\ & + (m_f^2 - p_f k) L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu a_i \bar{H}_\nu k]] \end{aligned} \quad (5.2.51)$$

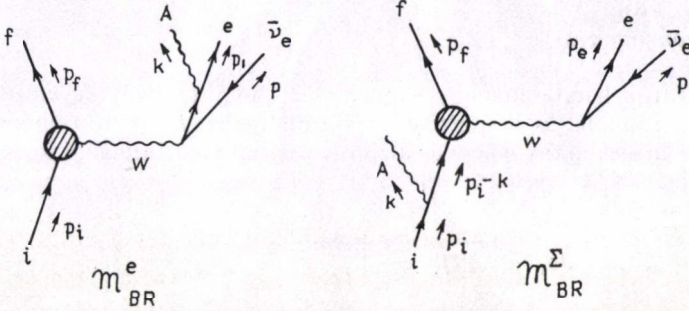
$$\begin{aligned} \sum_{s_e, s_1, s_f} 2 \operatorname{Re} [\mathcal{M}_{BR}^{e*} \mathcal{M}_{BR}^p] = & \frac{G_F^2}{2} \frac{e^2}{(p_e k) (p_f k)} [2 (p_e p_f) L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} + \\ & + \operatorname{Tr} [2 \gamma^\mu (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\nu k p_f p_e] H_{\mu\nu} + L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu a_i \bar{H}_\nu a_f p_e k] + \\ & + \frac{1}{2} \operatorname{Tr} [2 \gamma^\mu (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\nu k \gamma^q p_e] \operatorname{Tr} [H_\mu a_i \bar{H}_\nu a_f \gamma_s k]]. \end{aligned} \quad (5.2.52)$$

Az (5.2.51) képlet előállításához felhasználtuk, hogy a végállapotbeli hadron polari-
zálatlan. A fenti képletekben a_i és a_f a következő:

$$a_i = \frac{1}{2} (1 + \gamma_5 s_i) (p_i + m_i)$$

$$a_f = (p_f + m_f) \quad (5.2.53)$$

II. $\Sigma^- \rightarrow n e \bar{\nu}_e \gamma$ típusú bomlások



Ebben az esetben is \mathcal{M}_{BR}^e megegyezik az (5.2.45) képlettel (e_x a bejövő baryon töltése)

$$\mathcal{M}_{BR} = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_s e^{*q} [\bar{u}_f H_\mu (p_i - k + m_i) \gamma_q u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{-2(p_i k)} = \quad (5.2.54)$$

$$= -\frac{G_F}{\sqrt{2}} e_s e^{*q} [\bar{u}_f H_\mu (2p_{iq} - k \gamma_q) u_i] [\bar{u}_e \gamma^\mu (1 - \gamma_5) v] \frac{1}{-2(p_i k)}$$

$$\sum_{s_e, s_1, s_i} |\mathcal{M}_{BR}|^2 = \sum_{s_e, s_1, s_i} \{ |\mathcal{M}_{BR}^e|^2 + 2 \operatorname{Re} [\mathcal{M}_{BR}^{e*} \mathcal{M}_{BR}^\Sigma] + |\mathcal{M}_{BR}^\Sigma|^2 \} \quad (5.2.55)$$

$$\sum_{s_e, s_1, s_i} |\mathcal{M}_{BR}^\Sigma|^2 = -\frac{G_F^2}{2} \frac{e^2}{(p_i k)^2} [m_i^2 L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} - m_i (p_i k) L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu \bar{H}_\nu a_f] -$$

$$- (m_i^2 + p_i k) L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu k \bar{H}_\nu a_f]] \quad (5.2.56)$$

$$\sum_{s_e, s_1, s_i} 2 \operatorname{Re} [\mathcal{M}_{BR}^{e*} \mathcal{M}_{BR}^\Sigma] = \frac{G_F^2}{2} \frac{e^2}{(p_e k) (p_i k)} [2(p_i p_e) L^{\mu\nu} H_{\mu\nu} +$$

$$+ \operatorname{Tr} [2\gamma^\mu (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\nu k p_i p_e] H_{\mu\nu} - L^{\mu\nu} \operatorname{Tr} [H_\mu k p_e a_i \bar{H}_\nu a_f] -$$

$$- \operatorname{Tr} [2\gamma^\mu (1 - \gamma_5) p_1 \gamma^\nu k \gamma^q p_e] \operatorname{Tr} [H_\mu k \gamma^q a_i \bar{H}_\nu a_f]]. \quad (5.2.57)$$

Ebben az esetben,

$$a_i = (p_i + m_i)$$

$$a_f = \frac{1}{2} (1 + \gamma_5 s_f) (p_f + m_f). \quad (5.2.58)$$

Mivel a végállapotbeli fotont nem detektálják a kísérlet során, ezért (5.2.43) differenciális hatáskeresztmetszetben mindig kiintegrálunk a foton impulzusra. Mielőtt rátérnénk az integrálási fázistér tanulmányozására, vizsgáljuk meg a bremsstrahlung korrekciókat a soft foton limeszben.

C) Soft foton határeset

A soft foton határesetet úgy kapjuk meg, hogy (5.2.43) egyenletben a Dirac delta argumentumába és a mátrixelem számlálójába $k=0$ fotonimpulzust írunk. A soft foton járulék arányos lesz az alapfolyamattal és tartalmazni fogja az IR divergens részeket is.

I. $A^0 \rightarrow pe\bar{\nu}\gamma$

$$d\sigma_{BR, A^0}^{\text{soft}} = d\sigma_c \frac{-4\pi\alpha}{(2\pi)^3} \int' \frac{d^3k}{2k_0} \left[\frac{m_e^2}{(p_e k)^2} - \frac{2(p_f p_e)}{(p_e k)(p_f k)} + \frac{m_f^2}{(p_f k)^2} \right] \quad (5.2.59)$$

II. $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}\gamma$ típusú bomlások

$$d\sigma_{BR, \Sigma}^{\text{soft}} = d\sigma_0 \frac{-4\pi\alpha}{(2\pi)^3} \int' \frac{d^3k}{2k_0} \left[\frac{m_e^2}{(p_e k)^2} - \frac{2(p_i p_e)}{(p_e k)(p_i k)} + \frac{m_i^2}{(p_i k)^2} \right]. \quad (5.2.60)$$

Az integráljelnél a vessző azt jelenti, hogy az integrálást a $|k| < k_m$ tartományban kell elvégezni, ahol

$$k_m = p_i^0 - p_e^0 - p_f^0 \quad (5.2.61)$$

továbbá $d\sigma_0$ az (5.2.3) kifejezés. Regularizálásunk miatt:

$$k_0 = \sqrt{k^2 + \lambda^2} \quad k^2 = k_0^2 - \underline{k}^2 = \lambda^2. \quad (5.2.62)$$

Az (5.2.59) és (5.2.60) képletekben a k szerinti integrálást analitikusan elvégezhetjük. A következő összefüggéseket használjuk fel [27]:

$$\int' \frac{d^3k}{2k_0} \frac{1}{(p_i k)(p_j k)} = \pi\delta \cdot (R_1 + R_2) \quad (5.2.63)$$

$$R_1 = \frac{1}{2p_j(\delta p_i - p_j)} \ln \delta^2 \frac{p_i^2}{p_j^2} \ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} \quad (5.2.64)$$

$$R_2 = \int_0^1 dx \frac{1}{u^2} \frac{u_0}{|\underline{u}|} \ln \frac{u_0 - |\underline{u}|}{u_0 + |\underline{u}|} \quad (5.2.65)$$

ahol

$$0 = (\delta \cdot p_i - p_j)^2 = \delta^2 \cdot p_i^2 - 2\delta(p_i p_j) + p_j^2 \quad (5.2.66)$$

egyenlet azon megoldása, amelyre $\delta \cdot p_{i0} > p_{j0}$, vagyis

$$\delta = \frac{p_i p_j + \sqrt{(p_i p_j)^2 - p_i^2 p_j^2}}{p_i^2} \quad (5.2.67)$$

továbbá

$$u = p_j + x(\delta \cdot p_i - p_j). \quad (5.2.68)$$

Ha $p \equiv p_i = p_j$, akkor

$$\int' \frac{d^3 k}{2k_0} \frac{1}{(pk)^2} = \frac{\pi}{p^2} \left[\ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} + \frac{p_0}{|p|} \ln \frac{p_0 - |p|}{p_0 + |p|} \right]. \quad (5.2.69)$$

A fenti kifejezéseket felhasználva a soft járulékokra a következőket kapjuk:

I. $A^0 \rightarrow pe\bar{\nu}\gamma$

$$\begin{aligned} d\sigma_{BR, A^0}^{\text{soft}} &= d\sigma_0 \left(-\frac{\alpha}{2\pi} \right) \left[\ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} + \frac{E_e}{|p_e|} \ln \frac{E_e - |p_e|}{E_e + |p_e|} - \right. \\ &- \delta \frac{(p_f p_e)}{p_f(\delta p_e - p_f)} \ln \delta^2 \frac{m_e^2}{m_f^2} \ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} - 2\delta \cdot (p_e p_f) \int_0^1 dx \frac{1}{u^2} \frac{u_0}{|u|} \ln \frac{u_0 - |u|}{u_0 + |u|} + \\ &\left. + \ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} + \frac{E_f}{|p_f|} \ln \frac{E_f - |p_f|}{E_f + |p_f|} \right] \\ \delta &= \frac{(p_e p_f) + \sqrt{(p_e p_f)^2 - p_e^2 p_f^2}}{p_e^2} \end{aligned} \quad (5.2.70)$$

$$u = p_f + x(\delta \cdot p_e - p_f). \quad (5.2.71)$$

Könnyű észrevenni, hogy az (5.2.70)-ben az IR divergens járulékok (a λ -t tartalmazó tagok) éppen kiejtik a megfelelő virtuális fotonkorrekciókból kapott IR divergenciákat. Az első és harmadik sor első tagjában szereplő IR divergenciák a lepton és hadron foton sajátenergiákból kapott IR divergenciákat semlegesíti, a második sor első tagja pedig a box gráfból származó (5.2.42) divergenciát ejti ki. Ez utóbbi megmutatására szükség van néhány algebrai átalakításra és előnyös belemenni a kimenő hadron nyugalmi rendszerébe.

II. $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}\gamma$ típusú bomlások

$$\begin{aligned} d\sigma_{BR, \Sigma}^{\text{soft}} &= d\sigma_0 \left(-\frac{\alpha}{2\pi} \right) \left[\ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} + \frac{E_e}{|p_e|} \ln \frac{E_e - |p_e|}{E_e + |p_e|} - \right. \\ &- \delta \frac{(p_i p_e)}{p_i(\delta p_e - p_i)} \ln \delta^2 \frac{m_e^2}{m_i^2} \ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} - 2\delta \cdot (p_i p_e) \int_0^1 dx \frac{1}{u^2} \frac{u_0}{|u|} \ln \frac{u_0 - |u|}{u_0 + |u|} + \\ &\left. + \ln \frac{4k_m^2}{\lambda^2} + \frac{E_i}{|p_i|} \ln \frac{E_i + |p_i|}{E_i - |p_i|} \right], \end{aligned} \quad (5.2.72)$$

ahol

$$\delta = \frac{(p_e p_i) + \sqrt{(p_e p_i)^2 - p_e^2 p_i^2}}{p_e^2} \quad (5.2.73)$$

$$u = p_i + x(\delta \cdot p_e - p_i). \quad (5.2.74)$$

Ebben az esetben is az (5.2.72) képletben szereplő infravörös divergenciák kiejtik az (5.2.21) és (5.2.33) képletben szereplő megfelelő IR divergenciákat.

6. NUMERIKUS KIÉRTÉKELÉS ÉS EREDMÉNYEK

Az előző fejezetben leírtuk az összes elektromágneses korrekciót. A virtuális foton korrekcióknál a box gráf járulékát, (5.2.30) és (5.2.41) képleteket, numerikusan számoltuk ki. A spurok kiértékeléséhez a REDUCE algebrai programot használtuk fel. (Így jártunk el a bremsstrahlung korrekcióknál előforduló spurokkal is.)

A bremsstrahlung korrekciók esetében hátra van még egy fázistér integrál. A két-dimenziós Dalitz eloszláshoz a járulékok a következő (5.2.43):

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \sigma_{BR}(E_e, E_f)}{\partial E_e \partial E_f} &= \frac{\partial^2 \sigma_{BR}(x, y)}{R m_i^2 \partial x \partial y} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^8} \frac{1}{2m_i} \frac{\sqrt{E_e^2 - m_e^2} \sqrt{E_f^2 - m_f^2}}{4} \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta_e) \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta_f) \int_0^{2\pi} d\varphi_e \int_0^{2\pi} d\varphi_f \times \\ &\quad \times \int \frac{d^3 k}{2k_0} \delta[(p_i - p_e - p_f - k)^2] \theta(p_i^0 - E_e - E_f - k^0) \sum_{\substack{\text{spin} \\ \text{pol}}} |\mathcal{M}_{BR}|^2, \end{aligned} \quad (6.1)$$

ahol $\vartheta_e, \varphi_e; \vartheta_f, \varphi_f$ az elektron és a kimenő hadron hármassimpulzusának polárszögei, és a neutrino impulzusára kiintegrálhatunk.

A fenti 7 dimenziós integrálból 3 szögintegrált triviálisan elvégezhetünk, amely azzal van összefüggésben, hogy koordinátarendszerünket a térben tetszőlegesen felvehetjük. A Dirac-delta segítségével még egy integrált elvégezhetünk, amellyel 3-ra csökken az integrálási változók száma. Ez utóbbi művelet elvégzésében nagyon sok szabadságunk van, hiszen a maradék 4 változó helyett bevezethetünk új változókat. Ekkor természetesen bejön a transzformáció Jacobi-determinánsa is.

Mik a szempontjaink a változó megválasztásában? Van egy három változós integrálunk egy viszonylag hosszú és bonyolult integrandussal a spurok miatt. Ezt az integrált numerikusan végezzük el a DIVON2 integráló subroutine felhasználásával, amely tapasztalat szerint elég gyorsan működik. Ez utóbbi tulajdonság azért fontos, mert igen sokszor kell végeznünk az integrálást. (Sok Dalitz-pontra, formfaktor kombinációra és folyamatra és egyaránt polarizált és polarizálatlan esetre.) Ha az integrálandó függvény az integrálási tartományban nagyságrendeket változik, vagy bonyolult felületen lesz integrálható szingularitása, akkor a program csak nagy pontatlansággal és lassan tudja elvégezni a számolást. Éppen emiatt a változók megválasztásában mindig ügyelnünk kell arra, hogy a Jacobi determináns ne rendelkezzen az előbb említett tulajdonságokkal, ezzel tovább rontva az integrandus viselkedését. Ezenkívül célszerű, ha azt a paramétert, amelyre a Dirac deltával kiintegrálunk, a Dirac-delta lineárisan tartalmazza argumentumában.

Foglalkozunk egy kicsit a (6.1)-ben szereplő mátrixelemmel is. Ennek alakját az (5.2.44—5.2.58) képletekben adtuk meg, általánosan egy 3 törtből álló kifejezés, amelyek számlálójában spurok, a nevezőkben pedig impulzusok skalárszorzatai szerepelnek. Az (5.2.47)-ben a harmadik tag, amely a hadron bremsstrahlung amplitúdójának négyzete, nem okoz problémát az integrálás szempontjából, mert egy viszonylag sima viselkedésű függvény a hadronok nagy tömege miatt. (Adott $|k|$ mellett a $p_f \cdot k$ és $p_i k$ a Dalitz tartományon belül nem változik drasztikusan.) Ezzel szemben (5.2.47)-ben az első és második tag, amelyek az elektron bremsstrahlung amplitúdójának négyzetét és a kereszttagot írják le, a nevezőben szereplő $p_e \cdot k$ skalárszorzat az

elektron tömegének kicsinyisége miatt nagyon sok nagyságrendet tud változni. A Dalitz tartomány nagy részében, ahol a legtöbb mérési pont van az elektron relativisztikus. Ezért

$$p_e \cdot k = |k| E_e \left(1 - \frac{|p_e|}{E_e} \cos \vartheta \right) \approx |k| E_e \left(1 - \cos \vartheta + \frac{m_e^2}{2E_e^2} \cos \vartheta \right)$$

$$E, |p_e| \gg m_e \quad (6.2)$$

ahol ϑ a foton és elektron közötti szög. Látszik, hogy ha a kisugárzott foton közel kollineáris lesz, akkor a $p_e \cdot k$ skalárszorzat rögzített $|k|$ és E_e értékek mellett 8 nagyságrendet is változhat. Ez a kollineáris „szingularitás” adja a „vezető logaritmus” járulékokat az elektron kisugárzásában. Azt a közelítést, amikor csak a vezető logaritmust számolják ki gyakran használják az irodalomban [28].

A (6.2) nevezőnek ilyen óriási változása az integrálási tartományon belül komoly nehézségeket okoz a numerikus kiértékelésben. (Fontos emlékezni arra, hogy 3 dimenziós integrálást kell elvégeznünk.) Ezt a problémát a következőképpen oldhatjuk meg. (5.2.47)-ben a kereszt-tag nevezőjét azonosan két tagra bontjuk:

$$\frac{1}{(p_e k)(p_{i,f} k)} \equiv \frac{1}{(p_e k)(p_e k + p_{i,f} k)} + \frac{1}{(p_{i,f} k)(p_e k + p_{i,f} k)}. \quad (6.3)$$

A jobb oldal második tagját a hadron bremsstrahlung amplitúdó négyzetéhez hasonlóan integráljuk ki, mert ez egy sima függvény lesz. Az első tagból származó járulékokat viszont az elektron bremsstrahlung amplitúdó négyzetével együtt tárgyaljuk. Ebben az esetben olyan változó helyettesítést végzünk (Lorentz transzformáció), amely az elektront nyugalmi rendszerébe viszi. Ebben az esetben $p_e k = m_e k^0$, ezzel megszűnik az integrandus „rossz” viselkedése.

Még egy fontos dolgot el kell végeznünk a numerikus kiértékelés szempontjából. Ahogy ezt az 5.C fejezetben láttuk a bremsstrahlung járulékok infravörösen divergens. Ezért a mátrixelemből mindig levonjuk a megfelelő soft foton határesetet, így már egy jól integrálható integrandust kapunk. A soft foton járulékokat utólag hozzáadjuk az eredményhez. Ezek kiértékelhetőek részben kézzel (*IR* divergens részek) részben egy dimenziós integrálokat tartalmaznak, amelyeket már könnyen elvégezhetünk numerikusan. A (6.3) szétírás miatt a levonandó soft járulékok véges tagokban különbözni fognak az 5.C fejezetben leírtaktól, amit következetesen ki lehet számolni.

A táblázatainkban az (5.2.16) képletben szereplő $F_{ij}^{(s)}(x, y)$ függvények értékeit adjuk meg különböző x, y Dalitz plott pontokra, a $\Sigma^- \rightarrow n e \bar{\nu}$ folyamatra. Programjaink alkalmasak a $\Sigma^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}$, $\Xi^- \rightarrow \Lambda^0 e \bar{\nu}$, $\Xi^- \rightarrow \Sigma^0 e \bar{\nu}$ folyamatok esetén is a megfelelő függvények megadására.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki témavezetőmnek Szegő Károlynak és Tóth Kálmánnak, akikkel együtt végeztem el a számolásokat és a disszertáció elkészítésében segítséget nyújtottak. Szeretném megköszönni Kovács Mariann munkáját, aki a dolgozat leigézését pontosan és szépen végezte el.

A sugárzási korrekciók $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra
 $i=1$
 $j=1$ f_1^2

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{F, C}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{F, C}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	$0,956 \cdot 10^{-4}$	$0,551 \cdot 10^{-5}$	$0,576 \cdot 10^{-1}$
0,1	0,807	$0,174 \cdot 10^{-3}$	$0,842 \cdot 10^{-6}$	$0,484 \cdot 10^{-2}$
0,25	0,796	$0,102 \cdot 10^{-3}$	$0,789 \cdot 10^{-6}$	$0,774 \cdot 10^{-2}$
0,25	0,801	$0,202 \cdot 10^{-3}$	$-0,412 \cdot 10^{-5}$	$-0,205 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,805	$0,300 \cdot 10^{-3}$	$-0,942 \cdot 10^{-4}$	$-0,314 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,807	$0,374 \cdot 10^{-3}$	$-0,178 \cdot 10^{-4}$	$-0,476 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,792	$0,157 \cdot 10^{-3}$	$-0,115 \cdot 10^{-4}$	$-0,732 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,796	$0,249 \cdot 10^{-3}$	$-0,184 \cdot 10^{-4}$	$-0,741 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,801	$0,340 \cdot 10^{-3}$	$-0,257 \cdot 10^{-4}$	$-0,755 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,805	$0,430 \cdot 10^{-3}$	$-0,332 \cdot 10^{-4}$	$-0,773 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,807	$0,497 \cdot 10^{-3}$	$-0,454 \cdot 10^{-4}$	$-0,914 \cdot 10^{-1}$
0,65	0,792	$0,149 \cdot 10^{-3}$	$-0,189 \cdot 10^{-4}$	$-0,127$
0,65	0,796	$0,232 \cdot 10^{-3}$	$-0,275 \cdot 10^{-4}$	$-0,118$
0,65	0,801	$0,315 \cdot 10^{-3}$	$-0,363 \cdot 10^{-4}$	$-0,115$
0,65	0,805	$0,396 \cdot 10^{-3}$	$-0,456 \cdot 10^{-4}$	$-0,115$
0,65	0,807	$0,457 \cdot 10^{-3}$	$-0,581 \cdot 10^{-4}$	$-0,127$
0,85	0,796	$0,520 \cdot 10^{-4}$	$-0,111 \cdot 10^{-4}$	$-0,214$
0,85	0,801	$0,126 \cdot 10^{-3}$	$-0,221 \cdot 10^{-4}$	$-0,175$
0,85	0,805	$0,199 \cdot 10^{-3}$	$-0,317 \cdot 10^{-4}$	$-0,159$
0,85	0,807	$0,254 \cdot 10^{-3}$	$-0,421 \cdot 10^{-4}$	$-0,166$
0,95	0,805	$0,394 \cdot 10^{-4}$	$-0,887 \cdot 10^{-5}$	$-0,225$
0,95	0,807	$0,905 \cdot 10^{-4}$	$-0,180 \cdot 10^{-4}$	$-0,199$

A sugárzási korrekciók $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra
 $i=1$
 $j=1$ $f_1 f_2$

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{F, C}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{F, C}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	$0,167 \cdot 10^{-3}$	$0,822 \cdot 10^{-5}$	$0,491 \cdot 10^{-1}$
0,1	0,807	$0,310 \cdot 10^{-3}$	$-0,102 \cdot 10^{-5}$	$-0,331 \cdot 10^{-2}$
0,25	0,796	$0,175 \cdot 10^{-3}$	$-0,434 \cdot 10^{-6}$	$-0,247 \cdot 10^{-2}$
0,25	0,801	$0,354 \cdot 10^{-3}$	$-0,104 \cdot 10^{-4}$	$-0,293 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,805	$0,533 \cdot 10^{-3}$	$-0,211 \cdot 10^{-4}$	$-0,396 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,807	$0,667 \cdot 10^{-3}$	$-0,371 \cdot 10^{-4}$	$-0,556 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,792	$0,274 \cdot 10^{-3}$	$-0,225 \cdot 10^{-4}$	$-0,822 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,796	$0,437 \cdot 10^{-3}$	$-0,361 \cdot 10^{-4}$	$-0,825 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,801	$0,601 \cdot 10^{-3}$	$-0,502 \cdot 10^{-4}$	$-0,836 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,805	$0,764 \cdot 10^{-3}$	$-0,652 \cdot 10^{-4}$	$-0,853 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,807	$0,887 \cdot 10^{-3}$	$-0,881 \cdot 10^{-4}$	$-0,994 \cdot 10^{-1}$
0,65	0,792	$0,259 \cdot 10^{-3}$	$-0,348 \cdot 10^{-4}$	$-0,134$
0,65	0,796	$0,408 \cdot 10^{-3}$	$-0,517 \cdot 10^{-4}$	$-0,127$
0,65	0,801	$0,556 \cdot 10^{-3}$	$-0,684 \cdot 10^{-4}$	$-0,123$
0,65	0,805	$0,704 \cdot 10^{-3}$	$-0,864 \cdot 10^{-4}$	$-0,123$
0,65	0,807	$0,815 \cdot 10^{-3}$	$-0,110 \cdot 10^{-3}$	$-0,135$
0,85	0,796	$0,862 \cdot 10^{-4}$	$-0,185 \cdot 10^{-4}$	$-0,214$
0,85	0,801	$0,219 \cdot 10^{-3}$	$-0,397 \cdot 10^{-4}$	$-0,181$
0,85	0,805	$0,352 \cdot 10^{-3}$	$-0,586 \cdot 10^{-4}$	$-0,166$
0,85	0,807	$0,452 \cdot 10^{-3}$	$-0,786 \cdot 10^{-4}$	$-0,174$
0,95	0,805	$0,670 \cdot 10^{-4}$	$-0,154 \cdot 10^{-4}$	$-0,229$
0,95	0,807	$0,161 \cdot 10^{-3}$	$-0,332 \cdot 10^{-4}$	$-0,206$

A sugárzási korrekciók $\Sigma \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra
 $i=1$
 $f_1 g_1$
 $j=4$

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{r,c}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{r,c}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	$0,294 \cdot 10^{-4}$	$0,462 \cdot 10^{-5}$	0,157
0,1	0,807	$0,329 \cdot 10^{-5}$	$0,587 \cdot 10^{-5}$	$0,179 \cdot 10$
0,25	0,796	$0,677 \cdot 10^{-4}$	$0,631 \cdot 10^{-5}$	$0,932 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,801	$0,423 \cdot 10^{-4}$	$0,851 \cdot 10^{-5}$	0,201
0,25	0,805	$0,186 \cdot 10^{-4}$	$0,107 \cdot 10^{-4}$	0,574
0,25	0,807	$0,206 \cdot 10^{-5}$	$0,215 \cdot 10^{-5}$	$0,104 \cdot 10$
0,45	0,792	$0,295 \cdot 10^{-4}$	$0,112 \cdot 10^{-4}$	0,379
0,45	0,796	$0,193 \cdot 10^{-4}$	$0,126 \cdot 10^{-4}$	0,653
0,45	0,801	$0,109 \cdot 10^{-4}$	$0,140 \cdot 10^{-4}$	$0,129 \cdot 10$
0,45	0,805	$0,424 \cdot 10^{-5}$	$0,153 \cdot 10^{-4}$	$0,362 \cdot 10$
0,45	0,807	$0,419 \cdot 10^{-6}$	$0,103 \cdot 10^{-4}$	$0,247 \cdot 10^2$
0,65	0,792	$-0,360 \cdot 10^{-4}$	$0,179 \cdot 10^{-4}$	-0,498
0,65	0,796	$-0,292 \cdot 10^{-4}$	$0,170 \cdot 10^{-4}$	-0,584
0,65	0,801	$-0,205 \cdot 10^{-4}$	$0,163 \cdot 10^{-4}$	-0,792
0,65	0,805	$-0,102 \cdot 10^{-4}$	$0,156 \cdot 10^{-4}$	$-0,154 \cdot 10$
0,65	0,807	$-0,122 \cdot 10^{-5}$	$0,150 \cdot 10^{-4}$	$-0,123 \cdot 10^2$
0,85	0,796	$-0,776 \cdot 10^{-4}$	$0,230 \cdot 10^{-4}$	-0,296
0,85	0,801	$-0,520 \cdot 10^{-4}$	$0,163 \cdot 10^{-4}$	-0,314
0,85	0,805	$-0,246 \cdot 10^{-4}$	$0,118 \cdot 10^{-4}$	-0,479
0,85	0,807	$-0,286 \cdot 10^{-5}$	$0,875 \cdot 10^{-5}$	$-0,306 \cdot 10$
0,95	0,805	$-0,318 \cdot 10^{-4}$	$0,973 \cdot 10^{-5}$	-0,306
0,95	0,807	$-0,368 \cdot 10^{-5}$	$0,378 \cdot 10^{-5}$	$-0,103 \cdot 10$

A sugárzási korrekciók $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra
 $i=2$
 f_2^2
 $j=2$

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{r,c}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{r,c}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	$0,745 \cdot 10^{-4}$	$0,304 \cdot 10^{-5}$	$0,408 \cdot 10^{-1}$
0,1	0,807	$0,138 \cdot 10^{-3}$	$-0,158 \cdot 10^{-5}$	$-0,114 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,796	$0,777 \cdot 10^{-4}$	$-0,854 \cdot 10^{-6}$	$-0,110 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,801	$0,157 \cdot 10^{-3}$	$-0,589 \cdot 10^{-5}$	$-0,375 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,805	$0,237 \cdot 10^{-3}$	$-0,113 \cdot 10^{-4}$	$-0,476 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,807	$0,297 \cdot 10^{-3}$	$-0,190 \cdot 10^{-4}$	$-0,639 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,792	$0,121 \cdot 10^{-3}$	$-0,109 \cdot 10^{-4}$	$-0,903 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,796	$0,194 \cdot 10^{-3}$	$-0,175 \cdot 10^{-4}$	$-0,904 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,801	$0,267 \cdot 10^{-3}$	$-0,244 \cdot 10^{-4}$	$-0,915 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,805	$0,340 \cdot 10^{-3}$	$-0,317 \cdot 10^{-4}$	$-0,932 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,807	$0,396 \cdot 10^{-3}$	$-0,425 \cdot 10^{-4}$	-0,107
0,65	0,792	$0,115 \cdot 10^{-3}$	$-0,163 \cdot 10^{-4}$	-0,142
0,65	0,796	$0,181 \cdot 10^{-3}$	$-0,241 \cdot 10^{-4}$	-0,133
0,65	0,801	$0,247 \cdot 10^{-3}$	$-0,323 \cdot 10^{-4}$	-0,131
0,65	0,805	$0,314 \cdot 10^{-3}$	$-0,409 \cdot 10^{-4}$	-0,131
0,65	0,807	$0,364 \cdot 10^{-3}$	$-0,520 \cdot 10^{-4}$	-0,143
0,85	0,796	$0,382 \cdot 10^{-4}$	$-0,839 \cdot 10^{-5}$	-0,220
0,85	0,801	$0,974 \cdot 10^{-4}$	$-0,183 \cdot 10^{-4}$	-0,188
0,85	0,805	$0,157 \cdot 10^{-3}$	$-0,273 \cdot 10^{-4}$	-0,174
0,85	0,807	$0,202 \cdot 10^{-3}$	$-0,367 \cdot 10^{-4}$	-0,182
0,95	0,805	$0,298 \cdot 10^{-4}$	$-0,704 \cdot 10^{-5}$	-0,236
0,95	0,807	$0,719 \cdot 10^{-4}$	$-0,154 \cdot 10^{-4}$	-0,214

A sugárzási korrekciók $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra

$i=2$
 $j=4$ $f_2 g_1$

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{r,c}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{r,c}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	0	$0,281 \cdot 10^{-5}$	—
0,1	0,807	0	$0,523 \cdot 10^{-5}$	—
0,25	0,796	0	$0,288 \cdot 10^{-5}$	—
0,25	0,801	0	$0,586 \cdot 10^{-5}$	—
0,25	0,805	0	$0,885 \cdot 10^{-5}$	—
0,25	0,807	0	$0,111 \cdot 10^{-4}$	—
0,45	0,792	0	$0,447 \cdot 10^{-5}$	—
0,45	0,796	0	$0,715 \cdot 10^{-5}$	—
0,45	0,801	0	$0,984 \cdot 10^{-5}$	—
0,45	0,805	0	$0,125 \cdot 10^{-4}$	—
0,45	0,807	0	$0,145 \cdot 10^{-4}$	—
0,65	0,792	0	$0,420 \cdot 10^{-5}$	—
0,65	0,796	0	$0,660 \cdot 10^{-5}$	—
0,65	0,801	0	$0,901 \cdot 10^{-5}$	—
0,65	0,805	0	$0,114 \cdot 10^{-4}$	—
0,65	0,807	0	$0,132 \cdot 10^{-4}$	—
0,85	0,796	0	$0,138 \cdot 10^{-5}$	—
0,85	0,801	0	$0,352 \cdot 10^{-5}$	—
0,85	0,805	0	$0,565 \cdot 10^{-5}$	—
0,85	0,807	0	$0,726 \cdot 10^{-5}$	—
0,95	0,805	0	$0,107 \cdot 10^{-5}$	—
0,95	0,807	0	$0,257 \cdot 10^{-5}$	—

A sugárzási korrekciók $\Sigma^- \rightarrow ne\bar{\nu}_e$ folyamatra

$i=4$
 $i=4$ g_1^3

x	y	$F_{ij}^0(x, y)$	$F_{ij}^{r,c}(x, y)$	$\frac{F_{ij}^{r,c}(x, y)}{F_{ij}^0(x, y)}$
0,1	0,805	$0,243 \cdot 10^{-3}$	$0,386 \cdot 10^{-5}$	$0,159 \cdot 10^{-1}$
0,1	0,807	$0,191 \cdot 10^{-3}$	$0,553 \cdot 10^{-6}$	$0,290 \cdot 10^{-2}$
0,25	0,796	$0,597 \cdot 10^{-3}$	$-0,199 \cdot 10^{-4}$	$-0,334 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,801	$0,522 \cdot 10^{-3}$	$-0,178 \cdot 10^{-4}$	$-0,340 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,805	$0,447 \cdot 10^{-3}$	$-0,160 \cdot 10^{-4}$	$-0,357 \cdot 10^{-1}$
0,25	0,807	$0,390 \cdot 10^{-3}$	$-0,192 \cdot 10^{-4}$	$-0,491 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,792	$0,825 \cdot 10^{-3}$	$-0,621 \cdot 10^{-4}$	$-0,752 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,796	$0,743 \cdot 10^{-3}$	$-0,545 \cdot 10^{-4}$	$-0,733 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,801	$0,661 \cdot 10^{-3}$	$-0,491 \cdot 10^{-4}$	$-0,743 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,805	$0,577 \cdot 10^{-3}$	$-0,442 \cdot 10^{-4}$	$-0,766 \cdot 10^{-1}$
0,45	0,807	$0,514 \cdot 10^{-3}$	$-0,462 \cdot 10^{-4}$	$-0,899 \cdot 10^{-1}$
0,65	0,792	$0,817 \cdot 10^{-3}$	$-0,910 \cdot 10^{-4}$	$-0,111$
0,65	0,796	$0,727 \cdot 10^{-3}$	$-0,787 \cdot 10^{-4}$	$-0,108$
0,65	0,801	$0,636 \cdot 10^{-3}$	$-0,690 \cdot 10^{-4}$	$-0,109$
0,65	0,805	$0,543 \cdot 10^{-3}$	$-0,607 \cdot 10^{-4}$	$-0,112$
0,65	0,807	$0,474 \cdot 10^{-3}$	$-0,594 \cdot 10^{-4}$	$-0,125$
0,85	0,796	$0,547 \cdot 10^{-3}$	$-0,998 \cdot 10^{-4}$	$-0,183$
0,85	0,801	$0,447 \cdot 10^{-3}$	$-0,690 \cdot 10^{-4}$	$-0,154$
0,85	0,805	$0,346 \cdot 10^{-3}$	$-0,521 \cdot 10^{-4}$	$-0,150$
0,85	0,807	$0,270 \cdot 10^{-3}$	$-0,441 \cdot 10^{-4}$	$-0,163$
0,95	0,805	$0,186 \cdot 10^{-3}$	$-0,379 \cdot 10^{-4}$	$-0,203$
0,95	0,807	$0,107 \cdot 10^{-3}$	$-0,209 \cdot 10^{-4}$	$-0,195$

IRODALOM

1. S. Weinberg, Phys. Rev. Lett. 19, 1264, 1967.
A. Salam, in Elementary Particle Theory, edited by N. Svartholm (Almqvist and Wrrksell, Stockholm, 1968.)
2. G. Passarino, M. Veltman, Nucl. Phys. B160, 151, 1979.
3. M. Consoli, Nucl. Phys. B160, 208, 1979.
4. M. Lemoine, M. Veltman, Nucl. Phys. B164, 445, 1980.
5. M. Green, M. Veltman, Nucl. Phys. B169, 137, 1980.
6. S. Sakakibara, Dorthmund preprint TH-1. 1980.
7. A. Sirlin, Rev. Mod. Phys. 50, 573, 1978.
8. W. Marciano, A. Sirlin, Phys. Rev. D22, 2695, 1980.
9. W. Marciano, A. Sirlin, Phys. Rev. Lett. 46, 163, 1981.
10. M. Veltman, Phys. Letts. 91B, 95, 1980.
11. F. Antonelli, M. Consoli, G. Corbo, Phys. Letts. 91B, 90, 1980.
12. W. Marciano, Phys. Rev. D20, 274, 1979.
13. T. Kinoshita, A. Sirlin, Phys. Rev. 113, 1652, 1959.
14. A. Sirlin, Phys. Rev. 164, 1767, 1967.
15. E. S. Abers, D. A. Dicus, R. E. Norton, H. R. Quinn, Phys. Rev. 167, 1461, 1968.
16. S. Suzuki, Y. Yokoo, Nucl. Phys. B94, 431, 1975.
17. A. Garcia, S. R. Juarez W., Phys. Rev. D22, 1132, 1980.
18. A. Sirlin, Phys. Rev. D22, 971, 1980.
19. G. 't Hooft, Nucl. Phys. B35, 167, 1971.;
B. W. Lee, Phys. Rev. D5, 823, 1972.;
B. W. Lee, J. Zinn-Justin, Phys. Rev. D5, 3121, 3137, 3155, 1972.;
G. 't Hooft, M. Veltman, Nucl. Phys. B44, 189, 1972.
20. D. A. Ross, J. C. Taylor, Nucl. Phys. B51, 125, 1973.
21. J. C. Taylor, Gauge theories of weak interactions, Cambridge University Press 1976.
22. T. W. Appelquist, J. R. Primack és H. R. Quinn, Phys. Rev. D6, 2998, 1972.; Phys. Rev. D7, 2998, 1973.;
W. Marciano, Nucl. Phys. B84, 132, 1975.;
P. Salomonson, Y. Ueda, Phys. Rev. D11, 2606, 1975.
23. J. Marciano, A. Sirlin, Nucl. Phys. B93, 303, 1975.
24. V. Linke, Nucl. Phys. B12, 669, 1969.
25. J. D. Bjorken and S. D. Drell, Relativistic Quantum Mechanics McGraw-Hill, New York, 1964.
26. G. 't Hooft, M. Veltman, Diagrammar, CERN yellow preprint.
27. G. 't Hooft, M. Veltman, Nucl. Phys. B153, 365, 1979.
28. A. De Rujula, R. Petronzio, A. Savoy—Navarro, Nucl. Phys. B154, 394, 1979.

FÜGGELÉK

A)

Lagrange függvény. Gráfszabályok

$$M = \frac{gF}{\sqrt{2}}; \quad \alpha = \frac{\lambda}{g^2}; \quad \beta = \mu + \lambda F^2; \quad m^2 = 4\alpha M^2 = 2\lambda F^2$$

$$x_\mu \equiv \partial_\mu x; \quad x^{[a} y^{b]} \equiv x^a y^b - x^b y^a$$

$$\begin{aligned}
 L_{\text{YM}} = & -W_{\mu,\nu}^+ W_{\mu,\nu}^- + W_{\mu,\nu}^+ W_{\nu,\mu}^- - \frac{1}{2} W_{\mu,\nu}^0 W_{\mu,\nu}^0 + \frac{1}{2} W_{\mu,\nu}^0 W_{\nu,\mu}^0 - \frac{1}{2} A_{\mu,\nu} A_{\nu,\mu} + \frac{1}{2} A_{\mu,\nu} A_{\nu,\mu} - \\
 & - igc \{ W_{\mu,\nu}^0 W_\mu^{[+} W_\nu^{-]} - W_\nu^0 W_\mu^{[+} W_{\mu,\nu}^{-]} + W_\mu^0 W_\nu^{[+} W_{\mu,\nu}^{-]} \} - \\
 & - igc \{ A_{\mu,\nu} W_\mu^{[+} W_\nu^{-]} - A_\nu W_\mu^{[+} W_{\mu,\nu}^{-]} + A_\mu W_\nu^{[+} W_{\mu,\nu}^{-]} \} - \\
 & - \frac{g^2}{2} (W_\mu^+ W_\mu^-)^2 + \frac{g^2}{2} (W_\mu^+ W_\nu^-)^2 + g^2 c^2 \{ W_\mu^0 W_\mu^+ W_\nu^0 W_\nu^- - W_\mu^0 W_\mu^0 W_\nu^+ W_\nu^- \} +
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + g^2 s^2 \{A_\mu W_\mu^+ A_\nu W_\nu^- - A_\mu A_\mu W_\nu^+ W_\nu^-\} + g^2 s c \{A_\mu W_\nu^0 (W_\mu^+ W_\nu^- + W_\nu^+ W_\mu^-) - \\
& \quad - 2A_\mu W_\mu^0 W_\nu^+ W_\nu^-\} \\
L_{\text{Higgs}} = & -M^2 W_\mu^+ W_\mu^- - \frac{1}{2} \frac{M^2}{c^2} W_\mu^0 W_\mu^0 - \varphi_{1\mu}^+ \varphi_{1\mu}^- - \frac{1}{2} \varphi_{1\mu}^0 \varphi_{1\mu}^0 - \frac{1}{2} Z_{1\mu} Z_{1\mu} - \frac{1}{2} m^2 Z^2 - \\
& - g M Z W_\mu^+ W_\mu^- - \frac{1}{2} g \frac{M}{c^2} W_\mu^0 W_\mu^0 Z - \frac{g}{2} i \{W_\mu^+ (\varphi^0 \varphi_{1\mu}^- - \varphi^- \varphi_{1\mu}^0) - W_\mu^- (\varphi^0 \varphi_{1\mu}^+ - \varphi^+ \varphi_{1\mu}^0)\} + \\
& + \frac{g}{2} \{W_\mu^+ (Z \varphi_{1\mu}^- - \varphi^- Z_{1\mu}) + W_\mu^- (Z \varphi_{1\mu}^+ - \varphi^+ Z_{1\mu})\} + \frac{g}{2} \frac{1}{c} \{W_\mu^0 (Z \varphi_{1\mu}^0 - \varphi^0 Z_{1\mu})\} - \\
& - i g \frac{s^2}{c} M W_\mu^0 (W_\mu^+ \varphi^- - W_\mu^- \varphi^+) + i g s M A_\mu (W_\mu^+ \varphi^- - W_\mu^- \varphi^+) - \\
& - i g \frac{1-2c^2}{2c} W_\mu^0 (\varphi^+ \varphi_{1\mu}^- - \varphi^- \varphi_{1\mu}^+) + i g s A_\mu (\varphi^+ \varphi_{1\mu}^- - \varphi^- \varphi_{1\mu}^+) - \\
& - \frac{1}{4} g^2 W_\mu^+ W_\mu^- (Z^2 + \varphi^{02} + 2\varphi^+ \varphi^-) - \frac{1}{8} g^2 \frac{1}{c^2} W_\mu^0 W_\mu^0 (Z^2 + \varphi^{02} + 2[2s^2 - 1]\varphi^+ \varphi^- - \\
& - g^2 s^2 A_\mu A_\mu \varphi^+ \varphi^- - \frac{1}{2} g^2 \frac{s^2}{c} W_\mu^0 \varphi^0 (W_\mu^+ \varphi^- + W_\mu^- \varphi^+) - \\
& - \frac{1}{2} g^2 i \frac{s^2}{c} W_\mu^0 Z (W_\mu^+ \varphi^- - W_\mu^- \varphi^+) + \frac{1}{2} g^2 s A_\mu \varphi^0 (W_\mu^+ \varphi^- + W_\mu^- \varphi^+) + \\
& + \frac{1}{2} i g^2 s A_\mu Z (W_\mu^+ \varphi^- - W_\mu^- \varphi^+) - g^2 \frac{s}{c} (2c^2 - 1) W_\mu^0 A_\mu \varphi^+ \varphi^- - \\
& - \frac{1}{g^2} 2\beta M^2 - \frac{1}{g} 2\beta M Z - \frac{1}{2} \beta (Z^2 + \varphi^{02} + 2\varphi^+ \varphi^-) + \frac{1}{g^2} 2M^4 \alpha - \\
& - g \alpha M Z (Z^2 + \varphi^{02} + 2\varphi^+ \varphi^-) - g^2 \frac{\alpha}{8} \{Z^4 + \varphi^{04} + 4\varphi^5 \varphi^- \varphi^+ \varphi^- + 4\varphi^{02} \varphi^+ \varphi^- + 4Z^2 \varphi^+ \varphi^- + \\
& + 2\varphi^{02} Z^2\} + \frac{M}{c} \varphi_{1\mu}^0 W_\mu^0 + M \varphi_{1\mu}^- W_\mu^+ + M \varphi_{1\mu}^+ W_\mu^- \\
L_{\text{fermion}} = & -\bar{\nu} \partial \nu - l \partial l + \frac{g i}{4c} \bar{\nu} \gamma^\mu (1 + \gamma_5) \nu W_\mu^0 + \frac{g i}{2\sqrt{2}} \bar{\nu} \gamma^\mu (1 + \gamma_5) l W_\mu^+ + \frac{g i}{2\sqrt{2}} l \gamma^\mu (1 + \gamma_5) \nu W_\mu^- + \\
& + \frac{i g}{4c} l \gamma^\mu (4s^2 - 1 - \gamma_5) l W_\mu^0 - i g s l \gamma^\mu l A_\mu \\
L_{\text{Yukawa}} = & -m_e l l - \frac{g i}{2\sqrt{2}} \frac{m_e}{M} \bar{\nu} (1 - \gamma_5) l \varphi^+ + \frac{i g}{2\sqrt{2}} \frac{m_e}{M} l (1 + \gamma_5) \nu \varphi^- - \frac{1}{2} g \frac{m_e}{M} l l Z - \\
& - \frac{i g}{2} \frac{m_e}{M} l \gamma^5 l \varphi^0.
\end{aligned}$$

Az alábbiakban α a gauge paraméter.

$$L_{\text{mérték rögz.}} = -\frac{1}{\alpha} W_{\mu,\mu}^+ W_{\nu,\mu}^- - \frac{1}{2\alpha} W_{\mu,\mu}^0 W_{\nu,\nu}^0 - \frac{1}{2\alpha} A_\mu A_\mu A_{\mu\nu} - \alpha M^2 \varphi^+ \varphi^- -$$

$$-\frac{1}{2} \alpha \frac{M^2}{c^2} \varphi^0 \varphi^0 - M W_\mu^- \varphi_{1\mu}^+ - M \varphi_{1\mu}^- W_\mu^+ - \frac{M}{c} W_\mu^0 \varphi_{1\mu}^0$$

$$\begin{aligned} L_{\text{ghost}} = & \bar{X}^+ \partial^2 X^+ - \alpha M^2 \bar{X}^+ X^+ + \bar{X}^- \partial^2 X^- - \alpha M^2 \bar{X}^- X^- + \bar{Y}^0 \partial^2 Y^0 - \alpha \frac{M^2}{c^2} \bar{Y}^0 Y^0 + \\ & + \bar{Y}^A \partial^2 Y^A - i g s W_\mu^+ (\bar{X}_{1\mu}^+ Y^A - \bar{Y}_{1\mu}^A X^-) + i g c W_\mu^+ (\bar{Y}_{1\mu}^0 X^- - \bar{X}_{1\mu}^+ Y^0) - \\ & - i g s W_\mu^- (\bar{Y}_{1\mu}^A X^+ - \bar{X}_{1\mu}^- Y^A) + i g c W_\mu^- (\bar{X}_{1\mu}^- Y^0 - \bar{Y}_{1\mu}^0 X^+) - \\ & - i g s A_\mu (\bar{X}_{1\mu}^- X^- - \bar{X}_{1\mu}^+ X^+) - i g c W_\mu^0 (\bar{X}_{1\mu}^- X^- - \bar{X}_{1\mu}^+ X^+) - \\ & - \frac{1}{2} \alpha g M Z \left(\bar{X}^+ X^+ + \bar{X}^- X^- + \frac{1}{c^2} \bar{Y}^0 Y^0 \right) + i \alpha g \frac{1-2c^2}{2c} M (\bar{X}^+ Y^0 \varphi^+ - \bar{X}^- Y^0 \varphi^-) + \\ & + i \alpha g \frac{1}{2} \frac{M}{c} (\bar{Y}^0 X^- \varphi^+ - \bar{Y}^0 X^+ \varphi^-) - i \alpha g s M (\bar{X}^+ Y^A \varphi^+ - \bar{X}^- Y^A \varphi^-) - \\ & - \frac{1}{2} i \alpha g M (\bar{X}^- \bar{X}^- - \bar{X}^+ X^+) \varphi^0 \end{aligned}$$

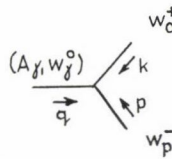
A gráfszabályoknál a propagátorokhoz $\frac{1}{(2\pi)^4 i}$, a vertexekhez pedig $(2\pi)^4 i$ szorzófaktorokat kell figyelembe venni. Propagátorok:

$\overbrace{\mu \quad \nu}^{A_\mu}$	$\frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2 - i\varepsilon}$	$\cdots \cdots \cdots Z \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 + m^2 - i\varepsilon}$
$\frac{W_\mu^0}{\quad}$	$\frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2 + M_0^2 - i\varepsilon}$	$\cdots \cdots \cdots \varphi^0 \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 + M_0^2 - i\varepsilon}$
$\frac{W^\pm}{\quad}$	$\frac{\delta_{\mu\nu}}{k^2 + M^2 - i\varepsilon}$	$\cdots \cdots \cdots \varphi^\pm \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 + M^2 - i\varepsilon}$
$\frac{l}{\longrightarrow}$	$\frac{-ik + m_e}{k^2 + m_e^2 - i\varepsilon}$	$\cdots \cdots \cdots X^\pm \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 + M^2 - i\varepsilon}$
$\frac{\nu}{\longrightarrow}$	$\frac{-ik}{k^2 - i\varepsilon}$	$\cdots \cdots \cdots Y^0 \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 + M_0^2 - i\varepsilon}$
		$\cdots \cdots \cdots Y^A \cdots \cdots \cdots$	$\frac{1}{k^2 - i\varepsilon}$

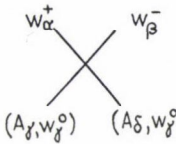
Vertexek:

$$\alpha = \frac{4s^2 - 1}{4c} \quad b = -\frac{1}{4c}$$

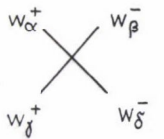
$-igb\gamma^\mu(1+\gamma_5)$	$\frac{ig}{2\sqrt{2}}\gamma^\mu(1+\gamma_5)$	$-igs\gamma_\mu$	$ig\gamma_\mu(\alpha+b\gamma_5)$
$\mp \frac{ig}{2\sqrt{2}}(1 \mp \gamma_5) \frac{m_l}{M}$	$-\frac{1}{2}g \frac{m_l}{M}$	$-\frac{1}{2}ig\gamma_5 \frac{m_l}{M}$	
$\frac{ig}{2c}(q-p)_\mu$	$\frac{ig}{2}(q-p)_\mu$	$\mp \frac{1}{2}g(q-p)_\mu$	$+\frac{1}{2}g \frac{s^2 - c^2}{c}(q-p)_\mu$
$-Mg\delta_{\mu\nu}$	$-\frac{1}{2} \frac{Mg}{c^2} \delta_{\mu\nu} 2!$	$\pm iMgs\delta_{\mu\nu}$	$\mp iMg \frac{s^2}{c} \delta_{\mu\nu}$
			$gs(p-q)_\mu$
$\pm c g q_\mu$	$\pm c g q_\mu$	$\mp s g q_\mu$	
$\pm s g q_\mu$	$\pm s g q_\mu$	$\mp c g q_\mu$	



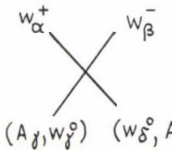
$$-g(s, c)[\delta_{\alpha\gamma}(k-q)_\beta + \delta_{\beta\alpha}(p-k)_\gamma + \delta_{\gamma\beta}(q-p)_\alpha]$$



$$-g^2(s^2, c^2)[\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}] \cdot 2!$$



$$-\frac{1}{2}g^2[\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}] \cdot 2! \cdot 2!$$



$$-g^2 sc[2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}]$$

B)

Skalár egy-loop integrálok

B.1. Általános összefüggések

$$\frac{1}{a_1^{\alpha_1} \dots a_r^{\alpha_r}} = \frac{\Gamma(\alpha_1 + \dots + \alpha_r)}{\Gamma(\alpha_1) \dots \Gamma(\alpha_r)} \int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \dots \int_0^{x_{r-2}} dx_{r-1} \times$$

$$\times \frac{x_{r-1}^{\alpha_1-1} (x_{r-2} - x_{r-1})^{\alpha_2-1} \dots (1-x_1)^{\alpha_r-1}}{[a_1 x_{r-1} + a_2 (x_{r-2} - x_{r-1}) + \dots + a_r (1-x_1)]^{\alpha_1 + \dots + \alpha_r}}$$

$$\frac{1}{a_1 \dots a_n} = \Gamma(n) \int_0^1 dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \dots \int_0^{x_{n-2}} dx_{n-1} \frac{1}{[a_1 x_{n-1} + a_2 (x_{n-2} - x_{n-1}) + \dots + a_n (1-x_1)]^n}$$

$$n=2 \quad \frac{1}{a_1 a_2} = \int_0^1 dx \frac{1}{[(a_1 - a_2)x + a_2]^2}$$

$$n=3 \quad \frac{1}{a_1 a_2 a_3} = 2 \int_0^1 dx \int_0^x dy \frac{1}{[a_1 y + a_2 (x-y) + a_3 (1-x)]^3}$$

$$n=4 \quad \frac{1}{a_1 a_2 a_3 a_4} = 3! \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz \frac{1}{[a_1 z + a_2 (y-z) + a_3 (x-y) + a_4 (1-x)]^4}$$

$$\int_0^\pi \sin^m \theta d\theta = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m+2}{2}\right)} \quad \int d^n x f(r) = \frac{2\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \int_0^\infty f(r) r^{n-1} dr$$

$$d^n x = r^{n-1} dr \sin^{n-2} \theta_{n-1} \sin^{n-3} \theta_{n-2} \dots d\theta_{n-1} \dots d\theta_1$$

$$\int_0^\infty dx \frac{x^\beta}{(x^2 + M^2)^\alpha} = \frac{1}{2} \frac{\Gamma\left(\frac{\beta+1}{2}\right) \Gamma\left(\alpha - \frac{\beta+1}{2}\right)}{\Gamma(\alpha) [M^2]^{\left(\alpha - \frac{\beta+1}{2}\right)}}$$

$$\int d^n p \frac{p^{\mu_1} \dots p^{\mu_e}}{(p^2 + 2pk + M^2)^\alpha} = \frac{1}{2!} \frac{\Gamma(l-\alpha)}{\Gamma(\alpha)} \frac{\partial}{\partial k_{\mu_1}} \dots \frac{\partial}{\partial k_{\mu_e}} \int d^n p \frac{1}{(p^2 + 2pk + M^2)^{\alpha-l}}$$

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t} t^{z-1} dt \quad \Gamma(n+1) = n!$$

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad \Gamma(z) = \sum_{m=0}^\infty \frac{(-1)^m}{m!} \frac{1}{z+m} + Q(z) \quad z \approx 0$$

$$\int d^n q \frac{1}{(q^2 + 2kq + m^2)^\alpha} = \frac{i\pi^{n/2}}{(m^2 - k^2)^{\alpha - \frac{n}{2}}} \frac{\Gamma\left(\alpha - \frac{n}{2}\right)}{\Gamma(\alpha)} \stackrel{\alpha \rightarrow 2}{\approx} i\pi^2 [\Delta - \ln(m^2 - k^2)]$$

$$\Gamma(x) \approx \frac{1}{x} - \gamma \dots \quad x \rightarrow 0$$

$$a^x \approx 1 + x \ln a + \dots$$

$$\Delta = -\frac{2}{n-4} - \gamma - \ln \pi$$

$$\boxed{\ln A^2 \equiv \Delta}$$

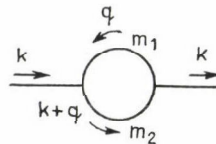
$$\int d^n q \frac{q_\mu}{(q^2 + 2kq + m^2)^\alpha} = \frac{i\pi^{n/2}}{(m^2 - k^2)^{\alpha - \frac{n}{2}}} \frac{\Gamma\left(\alpha - \frac{n}{2}\right)}{\Gamma(\alpha)} (-k_\mu)$$

$$\int d^n q \frac{q_\mu q_\nu}{(q^2 + 2kq + m^2)^\alpha} = \frac{i\pi^{n/2}}{(m^2 - k^2)^{\alpha - \frac{n}{2}}} \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \left\{ \Gamma\left(\alpha - \frac{n}{2}\right) k_\mu k_\nu + \Gamma\left(\alpha - 1 - \frac{n}{2}\right) \frac{1}{2} \delta_{\mu\nu} (m^2 - k^2) \right\}$$

B.2. Egy pontfüggvény

$$A(m) \equiv \frac{1}{i\pi^2} \int d^n q \frac{1}{q^2 + m^2} = m^2 (-\Delta - 1 + \ln m^2) \equiv m^2 \left[\ln \frac{m^2}{\Lambda^2} - 1 \right]$$

B.3. Kétpontfüggvény



$$B_{0; \mu; \nu}(k, m_1, m_2) \equiv \frac{1}{i\pi^2} \int d^n q \frac{1; q_\mu; q_\mu q_\nu}{[q^2 + m_1^2][(q+k)^2 + m_2^2]}$$

$$K(k^2, m_1, m_2) \equiv -k^2 x^2 + x(k^2 + m_2^2 - m_1^2) + m_1^2$$

$$B_0(k, m_1, m_2) = \Delta - \int_0^1 dx \ln K(k^2, m_1, m_2)$$

$$B_\mu(k, m_1, m_2) = k_\mu \left[-\frac{1}{2} \Delta + \int_0^1 dx x \ln K(k^2, m_1, m_2) \right] \equiv k_\mu B_1(k^2, m_1, m_2)$$

$$B_{\mu\nu}(k_1, m, m_2) = k_\mu k_\nu \left[\frac{1}{3} \Delta - \int_0^1 dx x^2 \ln K(k^2, m, m_2) \right] + \\ + \delta_{\mu\nu} \left[-\frac{1}{4} (\Delta + 1) \left(m_1^2 + m_2^2 + \frac{k^2}{3} \right) + \frac{1}{2} \int_0^1 dx K(k^2, m_1, m_2) \ln K(k^2, m_1, m_2) \right] \equiv$$

$$\equiv k_\mu k_\nu B_{21}(k^2, m_1, m_2) + \delta_{\mu\nu} B_{22}(k^2, m_1, m_2)$$

$$B_0(k^2, m_1, m_2) = B_0(k^2, m_2, m_1)$$

$$B_1(k^2, m_1, m_2) = -B_1(k^2, m_2, m_1) - B_0(k^2, m_2, m_1)$$

$$B_{22}(k^2, m_1, m_2) = B_{22}(k^2, m_2, m_1)$$

$$B_{21}(k^2, m_1, m_2) = B_{21}(k^2, m_2, m_1) + 2B_1(k^2, m_2, m_1) + B_0(k^2, m_2, m_1)$$

$$k^2 B_{21} + 4B_{22} = A(m_2) - m_1^2 B_0$$

$$k^2 B_{21} + B_{22} = \frac{1}{2} A(m_2) + \frac{1}{2} (m_1^2 - m_2^2 - k^2) B_1.$$

Közelítő formulák

$$M^2 \gg k^2, m^2 \quad B(k^2, M, m) \equiv B(M, m)$$

$$B_0(m, M) \approx \ln \frac{A^2}{M^2} + 1$$

$$B_1(m, M) \approx -\frac{1}{2} \ln \frac{A^2}{M^2} - \frac{1}{4} \quad B_1(M, m) \approx -\frac{1}{2} \ln \frac{A^2}{M^2} - \frac{3}{4}$$

$$B_{21}(m, M) \approx \frac{1}{3} \ln \frac{A^2}{M^2} + \frac{1}{9} \quad B_{21}(M, m) \approx \frac{1}{3} \ln \frac{A^2}{M^2} + \frac{11}{8}$$

$$B_{22}(m, M) \approx -\frac{1}{4} \left(\ln \frac{A^2}{M^2} + 1 \right) \left(m^2 + M^2 + \frac{k^2}{3} \right) - \frac{1}{4} \left(\frac{5}{18} k^2 + \frac{M^2}{2} + \frac{3}{2} m^2 \right)$$

$k^2=0$ esetben néhány összefüggés

$$B_0(0, m, m_2) = \ln \frac{A^2}{m_1^2} - \int_0^1 dx \ln \left[1 - x \left(1 - \frac{m_2^2}{m_1^2} \right) \right]$$

$$B_1(0, m_1, m_2) = -\frac{1}{2} \ln \frac{A^2}{m_1^2} + \int_0^1 dx x \ln \left[1 - x \left(1 - \frac{m_2^2}{m_1^2} \right) \right]$$

$$B_0(0, M, M) = \ln \frac{A^2}{M^2}$$

$$B_0(0, 0, M) = \ln \frac{A^2}{M^2} + 1$$

$$B_0(0, M, M_0) = \ln \frac{A^2}{M^2} + 1 + \frac{\ln c^2}{1 - c^2} \quad c^2 = \frac{M^2}{M_0^2}$$

A B függvények deriváltjai

$$\left. \frac{\partial B_0(k^2, m_1, m_2)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \equiv B_0^1 = \int_0^1 dx \frac{x(x-1)}{m^2 x^2 + x(-m^2 + m_2^2 - m_1^2) + m_1^2}$$

$$\left. \frac{\partial B_1(k^2, m_1, m_2)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \equiv B_1^1 = \int_0^1 dx \frac{x^2(x-1)}{m^2 x^2 + x(-m^2 + m_2^2 - m_1^2) + m_1^2}$$

Infravörös divergenciák

$$\left. \frac{\partial B_0(k^2, \lambda, m)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \frac{1}{2m^2} \left(2 - \ln \frac{m^2}{\lambda^2} \right)$$

$$\left. \frac{\partial B_1(k^2, \lambda, m)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \approx \frac{1}{2m^2}$$

$$\left. \frac{\partial B_1(k^2, m, \lambda)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \approx \frac{1}{2m^2} \left(\ln \frac{m^2}{\lambda^2} - 3 \right)$$

$$B_0(-m^2, \lambda, m) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} \ln \frac{\Lambda^2}{m^2} + 2$$

$$B_1(-m^2, \lambda, m) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2} \left(\ln \frac{\Lambda^2}{m^2} + 1 \right)$$

$$B_1(-m^2, m, \lambda) \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} -\frac{1}{2} \left(\ln \frac{\Lambda^2}{m^2} + 3 \right)$$

B.4. Hárompontfüggvények

$$C_0, \mu, \mu\nu(p_1, p_2, m_1, m_2, m_3) = \frac{1}{i\pi^2} \int d^n q \frac{1; q_\mu; q_\mu q_\nu}{[q^2 + m_1^2][(q+p_1)^2 + m_2^2][(q+p_1+p_2)^2 + m_3^2]}$$

B.5. Néhány speciális egy-loop integrál

$$\frac{1}{i\pi^2} \int d^n k \frac{k_\mu k_\nu}{[k^2 + m_1^2][k^2 + m_2^2]k^2} = \delta_{\mu\nu} \left[\frac{1}{4} \ln \frac{\Lambda^2}{m_1^2} + \frac{3}{8} - \frac{1}{4} \frac{1}{\frac{m_1^2}{m_2^2} - 1} \ln \frac{m_1^2}{m_2^2} \right]$$

$$\frac{1}{i\pi^2} \int d^n k \frac{k_\mu k_\nu}{k^4[k^2 + m^2]} = \delta_{\mu\nu} \left[\frac{1}{4} \ln \frac{\Lambda^2}{m^2} + \frac{3}{8} \right]$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\pi^2} \int d^4 k \frac{k_\mu k_\nu}{[k^2 + M^2][k^2 + M_0^2]k^4} &= \frac{\Gamma(4)}{i\pi^2} \int_0^1 dx \int_0^x dy \int d^4 k \frac{y k_\mu k_\nu}{[k^2 + M_0^2(x-y) + M^2(1-x)]^4} = \\ &= \frac{1}{2} \delta_{\mu\nu} \int_0^1 dx \int_0^x dy \frac{y}{M_0^2(x-y) + M^2(1-x)} = \\ &= \frac{1}{2M^2} \delta_{\mu\nu} \frac{c^2}{2s^2} \ln \frac{1}{c^2} \end{aligned}$$

$$c^2 = 1 - s^2 \equiv \frac{M^2}{M_0^2}$$

B.6. Gyakran előforduló integrálok

$$\int_0^1 dx \ln x = [x \ln x - x]_0^1 = -1$$

$$\int_0^1 dx x \ln x = \left[\frac{x^2}{2} \ln x - \frac{x^2}{4} \right]_0^1 = -\frac{1}{4}$$

$$\int_0^1 dx x^2 \ln x = \left[\frac{x^3}{3} \ln x - \frac{x^3}{9} \right]_0^1 = -\frac{1}{9}$$

$$\int_0^1 dx \ln(1+ax) = \frac{1}{a} [(1+a) \ln(1+a) - a] \quad a \geq -1$$

$$\int_0^1 dx x \ln(1+ax) = \frac{1}{a^2} \left[\frac{(1+a)^2}{2} \ln(1+a) - \frac{(1+a)^2}{4} - (1+a) \ln(1+a) + a + \frac{1}{4} \right]$$

C)

Fermion sajátenergiás járulékok

Hullámfüggvény renormálás

Írjuk a sajátenergiás betétet a következő alakba:

$$\Sigma(k) = ik[\sigma_L(k^2)P_L + \sigma_R(k^2)P_R] + \varrho(k^2)m + (2\pi)^4 i\delta m \quad (C.1)$$



A teljes propagátor

$$\rightarrow \text{---} \bigcirc \text{---} = \rightarrow \text{---} + \rightarrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \rightarrow \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} + \dots$$

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{(2\pi)^4 i} [ik + m - \tilde{\Sigma}(k)]^{-1} \quad (C.2)$$

(a \sim vonal mindig $\frac{1}{(2\pi)^4 i}$ szorzót jelent).Fejtsük sorba a σ és ϱ függvényeket $k^2 = -m^2$ körül

$$\sigma_{L,R}(k^2) = \sigma_0 + \sigma_1 \frac{k^2 + m^2}{m^2} + \dots \quad \sigma_0 \equiv \sigma(-m^2)$$

$$\varrho(k^2) = \varrho_0 + \varrho_1 \frac{k^2 + m^2}{m^2} + \dots \quad \sigma_1 = \left. \frac{\partial \sigma(k^2)}{\partial k^2} \right|_{k^2 = -m^2} \cdot m^2 \quad (C.3)$$

A teljes propagátor más alakban felírva:

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{(2\pi)^4 i} \frac{-ik[1 - \tilde{\sigma}_L P_L - \tilde{\sigma}_R P_R] + m(1 - \tilde{\varrho}) - \delta m}{k^2 \left[\left(1 - \frac{\tilde{\sigma}_L + \tilde{\sigma}_R}{2} \right)^2 - \left(\frac{\tilde{\sigma}_L - \tilde{\sigma}_R}{2} \right)^2 \right] + [m(1 - \tilde{\sigma}) - \delta m]^2} \quad (C.4)$$

A σ és ϱ függvények g^2 rendűek, ezért szorzataikat és magasabb hatványaikat elhanyagolhatjuk (1 loop számolásnál). Ezt figyelembe véve:

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{(2\pi)^4 i} \frac{-ik[1 - \tilde{\sigma}_L P_L - \tilde{\sigma}_R P_R] + m(1 - \tilde{\varrho}) - \delta m}{k^2 + m^2 - k^2[\tilde{\sigma}_L + \tilde{\sigma}_R] + m^2[-2\tilde{\varrho}] - 2m\delta m} \quad (C.5)$$

δm kontratagot úgy rögzítjük, hogy a $k^2 = -m^2$ maradjon a pólushely.

$$\delta m = m \left[\frac{1}{2} \tilde{\sigma}_{0L} + \frac{1}{2} \tilde{\sigma}_{0R} - \tilde{q}_0 \right]. \quad (C.6)$$

Most határozzuk meg a propagátor reziduumát a pólushelyen

$$\mathcal{D}(k) = \frac{1}{(2\pi)^4 i} \frac{-ikP_L Z_L - ikP_R Z_R + m \sqrt{Z_R Z_L}}{k^2 + m^2} = \frac{Z(-ik+m)Z}{k^2 + m^2} \quad (C.7)$$

$$Z = \sqrt{Z_R} P_L + \sqrt{Z_L} P_R \approx 1 + \frac{1}{2} \delta Z_R P_L + \frac{1}{2} \delta Z_L P_R$$

$$\delta Z_{L,R} \equiv Z_{L,R} - 1$$

$$Z = \sqrt{Z_L} P_L + \sqrt{Z_R} P_R \approx 1 + \frac{1}{2} \delta Z_L P_L + \frac{1}{2} \delta Z_R P_R$$

$$\delta Z = \frac{1}{2} (\delta Z_R P_L + \delta Z_L P_R)$$

$$\delta Z = \frac{1}{2} (\delta Z_L P_L + \delta Z_R P_R)$$

$$\delta Z_L = \tilde{\sigma}_{R0} - \tilde{\sigma}_{L1} - \tilde{\sigma}_{R1} + 2\tilde{q}_1$$

$$\delta Z_R = \tilde{\sigma}_{L0} - \tilde{\sigma}_{L1} - \tilde{\sigma}_{R1} + 2\tilde{q}_1.$$

(C.8)

A külső fermion vonalakon a következő helyettesítést kell elvégeznünk a spinorokon

$$\text{bemenő fermion} \quad u \rightarrow (1 + \delta \bar{Z}) u$$

$$\text{kimenő antifermion} \quad v \rightarrow (1 + \delta \bar{Z}) v$$

$$\text{kimenő fermion} \quad \bar{u} \rightarrow \bar{u}(1 + \delta Z)$$

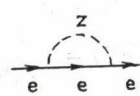
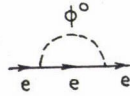
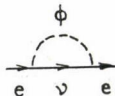
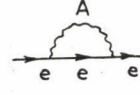
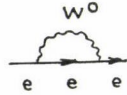
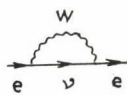
$$\text{bemenő antifermion} \quad \bar{u} \rightarrow \bar{u}(1 + \delta Z).$$

(C.9)

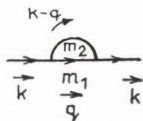
A továbbiakban megadjuk a δz és $\delta \bar{z}$ mennyiségeket a különböző fermionokra.

Tekintsük az elektront. A többi leptonra a számolás teljesen hasonló. A kvarkok esetében a Kobayashi—Maskawa mátrix jelenléte megváltoztatja egy kicsit a számolást, erre később még visszatérünk.

A következő gráfokat kell kiszámítanunk:



Az impulzusokat a következőképpen veszem fel:



$$\Sigma(k) = \int d^n q \frac{s(q)}{[q^2 + m_1^2][(q-k)^2 + m_2^2]} \quad (C.10)$$

$$M \equiv M_w \quad M_0 \equiv M_{w0}$$

$$B_{0;\mu}(k, m_1, m_2) = \frac{1}{i\pi^2} \int d^n q \frac{1; q_\mu}{[q^2 + m_1^2][(q-k)^2 + m_2^2]}$$

$$B_\mu(k, m_1, m_2) = -k_\mu B_1(k^2, m_1, m_2) \quad (C.11)$$

$$S^w(q) = -\frac{g^2}{2} [\gamma^\mu P_L (-iq) \gamma^\mu P_L] = \frac{g^2}{2} iq(2-n) P_L \quad (C.12a.)$$

$$S^{w0}(q) = -\frac{g^2}{c^3} \gamma^\mu [a_l^L P_L + a_l^R P_R] (-iq + m_l) [a_l^L P_L + a_l^R P_R] =$$

$$= \frac{g^2}{c^2} [iq(2-n)(a_l^{L2} P_L + a_l^{R2} P_R) - nm_l a_l^L a_l^R] \quad (C.12b)$$

$$S^A(q) = -g^2 s^2 e_l^2 \gamma^\mu [-iq + m_l] \gamma^\mu = g^2 s^2 e_l^2 [iq(2-n) - nm] \quad (C.12c)$$

$$S^\varphi(q) = \frac{g^2}{2} \frac{m_l^2}{M^2} [P_L (-iq) P_R] = -\frac{g^2}{2} \frac{m_l^2}{M^2} iq P_R \quad (C.12d)$$

$$S^0(q) = \frac{g^2}{4} \frac{m_l^2}{M^2} [-\gamma^5 (-iq + m_l) \gamma^5] = -\frac{g^2}{4} \frac{m_l^2}{M^2} [iq + m_l] \quad (C.12e)$$

$$S^\pi(q) = \frac{g^2}{4} \frac{m_l^2}{M^2} (-iq + m_l) \quad (C.12f)$$

$$\tilde{\sigma}_L^w = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} [1 + 2B_1(k^2, 0, M)] \quad \tilde{\sigma}_R^w = 0 \quad \tilde{q}^w = 0 \quad (C.13a)$$

$$\tilde{\sigma}_{L,R}^{w0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{a_l^{L,R2}}{c^2} [1 + 2B_1(k^2, m_l, M_0)] \quad \tilde{q}^{w0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{2a_l^L a_l^R}{c^2} [1 - 2B_0(k^2, m_l, M_0)] \quad (C.13b)$$

$$\tilde{\sigma}_{L,R}^A = \frac{g^2}{16\pi^2} s^2 e_l^2 [1 + 2B_1(k^2, m_l, \lambda)] \quad \tilde{q}^A = \frac{g^2}{16\pi^2} [2 - 4B_0(k^2, m_l, \lambda)] \quad (C.13c)$$

$$\tilde{\sigma}_L^\varphi = 0 \quad \tilde{\sigma}_R^\varphi = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \frac{m_l^2}{M^2} B_1(k^2, 0, M) \quad \tilde{q}^\varphi = 0 \quad (C.13d)$$

$$\tilde{\sigma}_{L,R}^{\varphi0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{4} \frac{m_l^2}{M^2} B_1(k^2, m_l, M_0) \quad \tilde{q}^{\varphi0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left(-\frac{1}{4}\right) \frac{m_l^2}{M^2} B_0(k^2, m_l, M_0) \quad (C.13e)$$

$$\tilde{\sigma}_{L,R}^Z = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{4} \frac{m_l^2}{M^2} B_1(k^2, m_l, m_Z) \quad \tilde{q}^Z = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{4} \frac{m_l^2}{M^2} B_0(k^2, m, m_Z) \quad (C.13f)$$

A különböző gráfok járuléka a hullámfüggvény renormálási konstanshoz a következők:

$$\delta z_L^W = \frac{g^2}{16\pi^2} [-m_i^2 B_1'(-m_i^2, 0, M)] \quad \delta z_R^W = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{1}{2} (1 + 2B_1(-m_i^2, 0, M)) - m_i^2 B_1'(-m_i^2, 0, M) \right] \quad (C.14a)$$

$$\delta z_{L,R}^{W^0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{a_{R,L}^2}{c^2} (1 + 2B_1(-m_i^2, m_l, M_0)) - \frac{a_L^2 + a_R^2}{c^2} 2m_i^2 B_1'(-m_i^2, m_l, M_0) - \right. \\ \left. - 8 \frac{a_L a_R}{c^2} m_i^2 B_0'(-m_i^2, m_l, M_0) \right] \quad (C.14b)$$

$$\delta z_{L,R}^A = \frac{g^2}{16\pi^2} (-s^2 t^2) \left[\ln \frac{\Lambda^2}{m_i^2} + 4 - 2 \ln \frac{m_i^2}{\lambda^2} \right] \quad (C.14c)$$

$$\delta z_L^P = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \frac{m_i^2}{M^2} \left[B_1(-m_i^2, 0, M) - m_i^2, 0, M \right] \quad (C.14d)$$

$$\delta z_R^P = \frac{g^2}{16\pi^2} \left(-\frac{1}{2} \frac{m_i^2}{M^2} \right) m_i^2 B_1'(-m_i^2, 0, M)$$

$$\delta z_{L,R}^{\varphi^0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{4} \frac{m_i^2}{M^2} [B_1(-m_i^2, m_l, M_0) - 2B_1'(-m_i^2, m_l, M_0) m_i^2 - 2m_i^2 B_0'(-m_i^2, m_l, M_0)] \quad (C.14e)$$

$$\delta z_{L,R} = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{4} \frac{m_i^2}{M^2} [B_1(-m_i^2, m_l, m_z) - 2m_i^2 B_1'(-m_i^2, m_l, m_z) + 2m_i^2 B_0'(-m_i^2, m_l, m_z)] \quad (C.14f)$$

A 3.3. paragrafus (töltés renormálás) kivételével mindig elegendő lesz $O(G_F \alpha)$ rendben megadni a hullámfüggvény renormálási konstansokat. Ebben az esetben a Higgsek járuléka elhagyható és a B függvényekre a B-függelékben megadott közelítő formulák használhatók. Mielőtt megadnánk ebben a közelítésben a δz kifejezéseket vizsgáljuk meg, milyen változásokat kapunk a quarkok esetében.

Legyen A_{ij} (3.2.14) a Kobayashi—Maskawa mátrix és $U_i \equiv (u, c, t)$; $d_i \equiv (d, s, b)$. Ebben az esetben a következőképpen néznek ki a gráfszabályok:

$$\begin{array}{cc} d' = A d \\ \begin{array}{c} u_i \\ \swarrow \quad \searrow \\ \quad \quad w^+ \\ \swarrow \quad \searrow \\ d_j \end{array} & \frac{ig}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L A_{ij} \quad \begin{array}{c} d_i \\ \swarrow \quad \searrow \\ \quad \quad w^- \\ \swarrow \quad \searrow \\ u_j \end{array} & \frac{ig}{\sqrt{2}} \gamma^\mu P_L (A^*)_{ij} \end{array}$$

A kvarkok esetén a tömegkontratag mátrixnak lesznek nem diagonális elemei is:

$$\begin{array}{ccc} u_i \xrightarrow{\quad \times \quad} u_j & \delta m_{ij}^u & d_i \xrightarrow{\quad \times \quad} d_j \quad \delta m_{ij}^d \end{array}$$

A vertex kontratagok:

$$- \frac{i \delta g}{\sqrt{2}} \gamma^\mu p_L (A^+)_{ij} \quad - \frac{i \delta g}{\sqrt{2}} \gamma^\mu p_L A_{ij}$$

A W sajátenergiás gráfok nem diagonális átmeneteket is elő tudnak idézni (flavour-ben). Tekintsük például a következő gráfot

$$\tilde{\sigma}_{L_{ki}}^W = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} [\delta_{ik} + 2A_{kj} B_1(k^2, m_{dj}, M) A_{ij}^+] \quad \tilde{\sigma}_R^W = 0 \quad \tilde{q}_{ki}^W = 0. \quad (C.15)$$

Könnyű megmutatni, hogy $O(G_F \alpha)$ rendben csak a diagonális tagok adnak járulékot és ebben a közelítésben a nem diagonális kontratagok is eltűnnek [23].

A μ és β bomlásoknál szükségünk lesz a fotonjárulék szétválasztására

$$\frac{1}{k^2} = \frac{1}{k^2 + M^2} + \frac{M^2}{M^2 + k^2} \frac{1}{k^2} - \frac{1}{k^2 + M^2} + \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{k^2 + M^2} \right) \quad (C.16)$$

$A > \quad A <$

Az $A >$ járulék $I.R.$ véges, de $U.V.$ divergens, az $A <$ pedig $I.R.$ végtelen, de $U.V.$ véges. Az $A >$ járulékot a gyenge korrekciókkal együtt tárgyaljuk. Ennek megfelelően:

$$\delta z \equiv \delta z^{A>} + \delta z^{A<} \quad (C.17)$$

$$\delta z^{A>} = \frac{g^2}{16\pi^2} s^2 e_l^2 \left[\frac{1}{2} - \ln \frac{\Lambda^2}{M^2} \right] \equiv \delta z^W \cdot 2 \cdot s^2 e_l^2 \quad (C.18)$$

$$\delta z^{A<} = \delta z^A - \delta z^{A>} = \frac{g^2}{16\pi^2} (-s^2 e_l^2) \left[\ln \frac{M^2}{m_l^2} + \frac{9}{2} - 2 \ln \frac{m_l^2}{\lambda^2} \right]. \quad (C.19)$$

Az $O(G_F \alpha)$ rendben tehát a következőképpen néznek ki a hullámfüggvény renormálási konstansok a különböző fermionokra

$$\delta z_{L,R} \equiv \delta z_{L,R}^W + \delta z_{L,R}^{W_0} + \delta z_{L,R}^{A>}; \quad \delta z^{A<}$$

$$\delta z_R^u = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{a_u^{L^2}}{c^2} + s^2 e_u^2 \right) \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{\Lambda^2}{M^2} \right) - \frac{a_u^{L^2}}{c^2} \ln c^2 \right] \quad (C.20)$$

$$\delta z_L^u = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\left(\frac{a_u^{R^2}}{c^2} + s^2 e_u^2 \right) \left(\frac{1}{2} - \ln \frac{\Lambda^2}{M^2} \right) - \frac{a_u^{R^2}}{c^2} \ln c^2 \right] \quad (C.21)$$

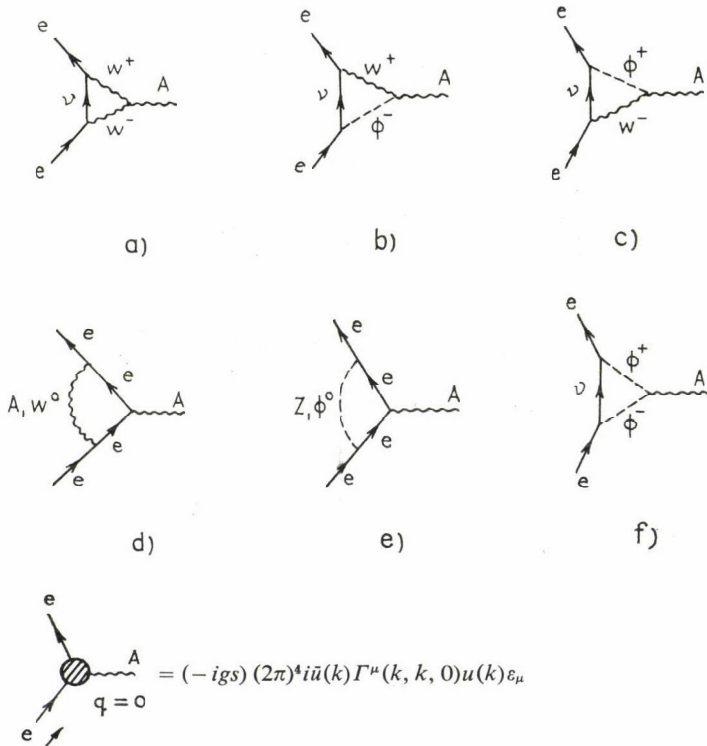
$$\delta z_u^{A<} = \frac{g^2}{16\pi^2} s^2 e_u^2 \left[2 \ln \frac{m_u^2}{\lambda^2} - \frac{9}{2} - \ln \frac{M^2}{m_u^2} \right]. \quad (C.22)$$

A többi fermionra a kifejezések hasonlóak, csak a megfelelő $a_f^{L,R}$ és e_f paramétereket kell beírni (C.20—C.22) képletekbe.

D)

Fermion-foton vertexkorrekciók

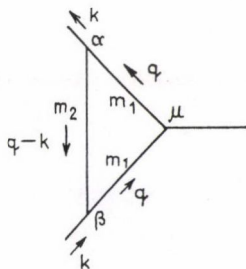
A következő gráfok járulékát kell kiszámítanunk:



$$= (-igs) (2\pi)^4 i \bar{u}(k) \Gamma^\mu(k, k, 0) u(k) \varepsilon_\mu \quad (D.1)$$

$$\Gamma^\mu(k, k, 0) = (V_L P_L + V_R P_R) \gamma^\mu \quad (D.1a)$$

A továbbiakban az $a)$ – $f)$ gráfok járulékát fogjuk meghatározni a V_L és V_R kifejezésekhez. Előtte számítsuk ki az előforduló hárompont függvényeket.



$$C_{0,\mu,\mu\nu}(0, -k, m_1, m_1, m_2) = \frac{1}{i\pi^2} \int d^n q \frac{1; q_\mu; q_\mu q_\nu}{[q^2 + m_1^2]^2 [(q-k)^2 + m_2^2]}. \quad (\text{D.2})$$

Bevezetve Feynman paramétereket:

$$\frac{1}{a_1^2 a_2} = 2 \int_0^1 dx \frac{x}{[a_1 x + a_2 (1-x)]^3} \quad (\text{D.3})$$

$$C_{0,\mu,\mu\nu}(0, -k, m_1, m_1, m_2) = \frac{2}{i\pi^2} \int_0^1 dx \int d^n q \frac{x(1; q_\mu; q_\mu q_\nu)}{[q^2 + 2Qq + \mathcal{M}^2]^3} \quad (\text{D.4})$$

$$Q = (x-1)k$$

$$\mathcal{M}^2 = (1-x)(k^2 + m_2^2 - m_1^2) + m_1^2 \quad (\text{D.5})$$

$$K(k^2, m_2, m_1) \equiv \mathcal{M}^2 - Q^2 = -k^2 x^2 + x(k^2 + m_1^2 - m_2^2) + m_2^2. \quad (\text{D.6})$$

A $d^n q$ integrálokat az ismert módon elvégezve a következőket kapjuk: $k^2 = -m_1^2$

$$C_0(0, -k, m_1, m_1, m_2) = \int_0^1 dx \frac{1-x}{K(k^2, m_2, m_1)} \quad (\text{D.7})$$

$$C_\mu(0, -k, m_1, m_1, m_2) = -k_\mu C_1(0, -k^2, m_1, m_1, m_2) = -k_\mu \int_0^1 dx \frac{x(x-1)}{K(k^2, m_1, m_2)} \quad (\text{D.8a})$$

$$C_1(0, -m_1^2, m_1, m_1, m_2) = B'_0(-m_1^2, m_1, m_2) \quad (\text{D.8b})$$

$$C_{\mu\nu}(0, -k, m_1, m_1, m_2) = C_{21}(0, k^2, m_1, m_1, m_2) k_\mu k_\nu + \delta_{\mu\nu} C_{22}(0, k^2, m_1, m_1, m_2) \quad (\text{D.9a})$$

$$C_{21} = \int_0^1 dx \frac{x^2(1-x)}{K(k^2, m_1, m_2)} \quad (\text{D.9b})$$

$$C_{22} = \frac{1}{4} \Delta - \frac{1}{2} \int_0^1 dx (1-x) \ln K(k^2, m_1, m_2) \quad (\text{D.9c})$$

$$C_{21}(0, -m_1^2, m_1, m_1, m_2) = B'_1(-m_1^2, m_1, m_2) \quad (\text{D.9d})$$

$$C_{22}(0, -m_e^2, m_1, m_1, m_2) = -\frac{1}{2} B_1(-m_e^2, m_2, m_1). \quad (\text{D.9e})$$

A (D.1a)-hoz gráfonként a következők a járulékok:
a), b) és c) gráf

$$V_L^a = \frac{g^2}{16\pi^2} m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M) \quad (\text{D.10a})$$

$$V_R^a = \frac{g^2}{16\pi^2} [-3B_1(-m_e^2, 0, M) - 1 + 2m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M)] \quad (\text{D.10b})$$

$$V_L^b = 0 \quad (\text{D.10c})$$

$$V_R^b = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[-\frac{m_e^2}{2} B_0'(-m_e^2, 0, M) - \frac{m_e^2}{2} C_0(0, -m_e^2, M, M, 0) \right] \quad (\text{D.10d})$$

$$V_L^c = 0 \quad (\text{D.10e})$$

$$V_R^c = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[-\frac{m_e^2}{2} B_0'(-m_e^2, 0, M) - \frac{m_e^2}{2} C_0(0, -m_e^2, M, M, 0) \right]. \quad (\text{D.10f})$$

Összeadva ezt a három járulékot

$$V_{L,R}^W \equiv V_{L,R}^c + V_{L,R}^b + V_{L,R}^a$$

$$V_L^W = \frac{g^2}{16\pi^2} m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M) \quad (\text{D.11})$$

$$V_R^W = \frac{g^2}{16\pi^2} [-1 - 3B_1(-m_e^2, 0, M) + 2m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M) - m_e^2 B_0'(-m_e^2, 0, M) - m_e^2 C_0(0, -m_e^2, M, M, 0)] \quad (\text{D.12})$$

d) gráf

$$V_L^{W^0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{a_R^2}{c^2} (-2m_e^2 B_1'(-m_e^2, m_e, M_0) + 2B_1(-m_e^2, m_e, M_0) + 1) + \frac{a_1^2}{c^2} (-2m_e^2) B_1'(-m_e^2, m_e, M_0) + \frac{a_1 a_R}{c^2} (-8m_e^2) B_0'(-m_e^2, m_e, M_0) \right] \quad (\text{D.13})$$

$$V_R^{W^0} = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[\frac{a_L^2}{c^2} (2m_e^2 B_1'(-m_e^2, m_e, M_0) - 2B_1(-m_e^2, m_e, M_0) - 1) + \frac{a_R^2}{c^2} 2m_e^2 B_1'(-m_e^2, m_e, M_0) + \frac{a_L a_R}{c^2} 8m_e^2 B_0'(-m_e^2, m_e, M_0) \right]$$

$$V_R^{W^0} = V_L^{W^0} (a_L \leftrightarrow a_R) \quad (\text{D.14})$$

$$V_{L,R}^A = \frac{g^2}{16\pi^2} \lambda^2 \left[\ln \frac{\lambda^2}{m_e^2} + 4 - 2 \ln \frac{m_e^2}{\lambda^2} \right] \quad (\text{D.15})$$

e) gráf

$$V_{L,R}^z = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{m_e^2}{4M^2} [2m_e^2 B_1'(-m_e^2, m_e, m_z) - 2m_e^2 B_0'(-m_e^2, m_e, m_z) - B_1(-m_e^2, m_e, m_z)]$$

$$V_{\varphi^0}^0 = V_{L,R}^z (m_z \leftrightarrow M_0) \quad (\text{D.17})$$

f) gráf

$$V_L^g = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \frac{m_e^2}{M^2} [-B_1(-m_e^2, 0, M) + m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M)] \quad (D.18)$$

$$V_R^g = \frac{g^2}{16\pi^2} \frac{1}{2} \frac{m_e^2}{M^2} m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M) \quad (D.19)$$

Felhasználva a (C.14a—C.14f) kifejezéseket a következő azonosságokat kapjuk:

$$\delta z_L^W + V_L^W = 0$$

$$\delta z_{L,R}^{W_0} + V_{L,R}^{W_0} = 0$$

$$\delta z_{L,R}^A + V_{L,R}^A = 0$$

$$\delta z_{L,R}^z + V_{L,R}^z = 0 \quad (D.20)$$

$$\delta z_{L,R}^{g_0} + V_{L,R}^{g_0} = 0$$

$$\delta z_{L,R}^g + V_{L,R}^g = 0$$

$$\begin{aligned} \delta z_R^W + V_R^W = \frac{g^2}{16\pi^2} \left[-\frac{1}{2} - 2B_1(-m_e^2, 0, M) + m_e^2 B_1'(-m_e^2, 0, M) - \right. \\ \left. - m_e^2 B_0'(-m_e^2, 0, M) - m_e^2 C_0(0, -m_e^2, M, M, 0) \right] \end{aligned} \quad (D.21)$$

$$\delta Z_R^W + V_R^W = \frac{g^2}{16\pi^2} \ln \frac{\Lambda^2}{M^2}. \quad (D.22)$$

A (D.20) és (D.22) kifejezések a töltés renormálásánál használhatók fel. Látjuk, hogy a saját-energiás és vertex korrekciók között erős kiejtődés történik.

E)

$A-W^0$ mixing és a foton sajátenergiás gráfok járulékai [2]



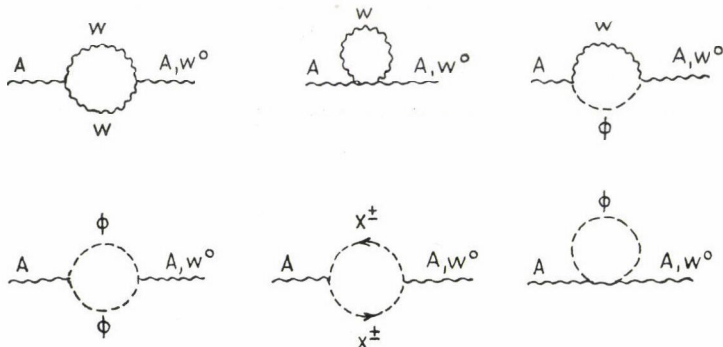
$$\tilde{\Pi}_{AA}^{\mu\nu}(q) \equiv \frac{1}{(2\pi)^4 i} \Pi_{AA}^{\mu\nu}(q) = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{AA}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{AA}(q^2) q^\mu q^\nu] \quad (E.1)$$

$$\tilde{\Pi}_{Aw^0}^{\mu\nu} = \frac{g^2}{16\pi^2} [A_{Aw^0}(q^2) \delta^{\mu\nu} + B_{Aw^0}(q^2) q^\mu q^\nu]. \quad (E.2)$$

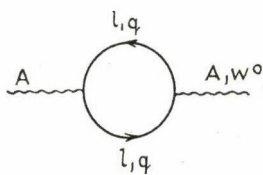
A foton sajátenergiához és a foton-semleges vektorbozon mixing taghoz járulékot adó egy loop integrálok jellegüket tekintve azonosak, csak az utóbbi esetben az egyik foton külső vonalát egy W^0 vonal helyettesíti.

A gráfok a következők:

1. vektorbozon, Higgs és ghost loopok (együttesen bozon járuléknak nevezzük ezeket a későbbiekben),



2. kvark és lepton loopok.

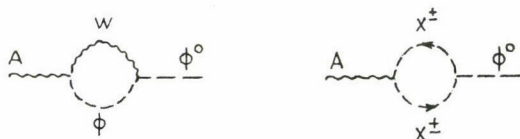


A Ward azonosságok megszorításokat adnak az A és B függvények között. Ezek segítségével számolásunk helyességét is ellenőrizhetjük.

$$q^2 B_{AA}(q^2) + A_{AA}(q^2) = 0 \quad (\text{E.3})$$

$$q^2 A_{Aw^0}(q^2) + q^4 B_{Aw^0}(q^2) + \frac{q^2 M_w^2}{c} R_{A\phi^0}(q^2) = 0 \quad (\text{E.4})$$

(E.4)-ben $R_{A\phi^0}(q^2)$ a következő gráfok járulékát jelenti



Az alábbiakban megadjuk az A és B függvényeket külön a bozon, lepton és quark loopokra. (A kvark járulékokhoz egy 3-as szorzófaktort hozzá kell érteni a szín miatt.)

$$A_{AA}(q^2) = -q^2 B_{AA}(q^2) \quad (\text{E.5})$$

$$B_{AA}(q^2) \equiv B_{AA}^{(b)}(q^2) + B_{AA}^{(l)}(q^2) + B_{AA}^{(q)}(q^2) \quad (\text{E.6})$$

$$B_{AA}^{(b)}(q^2) = -2s^2 \left[\frac{7}{2} B_0(q^2, M_w, M_w) - 6B_{21}(q^2, M_w, M_w) + \frac{1}{3} \right] = \quad (E.7)$$

$$= -s^2 \left[3 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{2}{3} + \int_0^1 dx [12(x-1)-2] \times \ln \left[1-x(1-x) \frac{-q^2}{M_w^2} \right] \right]$$

$$B_{AA}^{(b)}(0) = -3s^2 \left[\ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} + \frac{2}{9} \right] \quad (E.7a)$$

$$B_{AA}^{(l)}(q^2) = - \sum_{e, \mu, \tau, \dots} 8s^2 e_e^2 [B_{21}(q^2, m_e, m_e) + B_1(q^2, m_e, m_e)] \quad e_e^2 = (-1)^2 \quad (E.8)$$

$$B_{AA}^{(q)}(q^2) = - \sum_{u, d, \dots} 8s^2 e_q^2 [B_{21}(q^2, m_q, m_q) + B_1(q^2, m_q, m_q)] \quad (E.9)$$

$$A_{Aw0}^{(b)}(q^2) = \frac{s}{c} q^2 \left[\left(c^2 + \frac{1}{2} \right) B_0(q^2, M_w, M_w) + 2(1-6c^2) B_{21}(q^2, M_w, M_w) + \frac{2}{3} c^2 \right] -$$

$$- \frac{s}{c} 2M_w^2 B_0(q^2, M_w, M_w)$$

(E.10) könnyen kiértékelhető a $q^2 \rightarrow 0$ pontban

$$A_{Aw0}^{(b)}(0) = -2scM_w^2 \ln \frac{\Lambda^2}{M_w^2} \quad (E.11)$$

$$B_{Aw0}^{(b)}(q^2) = -\frac{s}{c} \left[\left(c^2 + \frac{1}{2} \right) B_0(q^2, M_w, M_w) + 2(1-6c^2) (B_1(q^2, M_w, M_w) + B_{21}(q^2, M_w, M_w)) + \frac{2}{3} c^2 \right]. \quad (E.12)$$

A fermion járulékokra az $A-W^0$ mixing tag esetén is igaz, hogy

$$A_{Aw0}^{(l,q)}(q^2) = -q^2 B_{Aw0}^{(l,q)}(q^2) \quad (E.13)$$

$$B_{Aw0}^{(l)}(q^2) = - \sum_{e, \mu, \tau, \dots} 8 \frac{s}{c} e_e (a_l^L + a_l^R) [B_{21}(q^2, m_e, m_e) + B_1(q^2, m_e, m_e)] \quad (E.14)$$

$$B_{Aw0}^{(q)}(q^2) = - \sum_{u, d, \dots} 8 \frac{s}{c} e_q (a_q^L + a_q^R) [B_{21}(q^2, m_q, m_q) + B_1(q^2, m_q, m_q)] \quad (E.15)$$

$$A_{Aw0}^{(l,q)}(0) = 0 \quad (E.16)$$

(E.5) miatt (E.1) a következőképpen írható:

$$\tilde{\Pi}_{AA}^{\mu\nu}(q) = \Pi_A(q^2) [q^2 \delta^{\mu\nu} - q^\mu q^\nu] \quad (E.17)$$

$$\Pi_A(q^2) = -\frac{g^2}{16\pi^2} B_{AA}(q^2). \quad (E.18)$$

Az (E.3) Ward azonosság biztosítja, hogy nem generálódik foton tömegtag. A foton hullámfüggvény renormálási konstans a következő:

$$Z^A = \frac{1}{1 - \Pi_A(0)} \approx 1 + \Pi_A(0) \quad (E.19)$$

$$\sqrt{Z^A} \approx 1 + \frac{1}{2} \Pi_A(0) \quad (E.20)$$

F)

Spinorok, Gamma-mátrixok

Euklideszi metrika [26]

$$\delta_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$k_\mu = (\underline{k}, ik_0) \quad k_\mu = ik_0$$

$$k^2 = \underline{k}^2 + k_0^2$$

$$\gamma^\mu = (\vec{\gamma}, \gamma^0) \quad \gamma^\mu = \gamma^0$$

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad \gamma^i = -i \begin{pmatrix} \sigma^i \\ -\sigma^i \end{pmatrix}$$

Minkowski metrika [25]

$$g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}$$

$$k^\mu = (k^0, \underline{k})$$

$$k^2 = k - \underline{k}^2$$

$$\gamma^\mu = (\gamma^0, \vec{\gamma})$$

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} \sigma_i \\ -\sigma_i \end{pmatrix}$$

ahol $\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ és σ^i a Pauli mátrixok

$$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A Dirac egyenlet:

$$(ik + m)u(k, s) = 0 \quad (k - m)u(k, s) = 0$$

$$(-ik + m)v(k, s) = 0 \quad (k + m)v(k, s) = 0$$

$$\bar{u} = u^\dagger \gamma^0 \quad \bar{u} = u^\dagger \gamma^0$$

$$\bar{u}u = 2m \quad \bar{u}u = 2m$$

$$\sum_{\pm s} u_\alpha(k, s) \bar{u}_\beta(k, s) = (-ik + m)_{\alpha\beta} \quad \sum_{\pm s} u_\alpha(k, s) \bar{u}_\beta(k, s) = (k + m)_{\alpha\beta}$$

$$\sum_{\pm s} v_\alpha(k, s) \bar{v}_\beta(k, s) = -(ik + m)_{\alpha\beta} \quad \sum_{\pm s} v_\alpha(k, s) \bar{v}_\beta(k, s) = (k - m)_{\alpha\beta}$$

Néhány azonosság a γ mátrixok között n -dimenziós esetben

$$\gamma_\mu a \gamma^\mu = (2 - n)a$$

$$\gamma_\mu ab \gamma^\mu = 4a \cdot b + (n - 4)ab$$

$$\gamma_\mu abc \gamma^\mu = -2cba + (4 - n)abc$$

G)

Ebben a függelékben kiszámítjuk a skalár 4-pont függvényeket, amelyek a foton box gráf számolásánál szükségesek. A skalár D függvényeket csak $O(1/M_w^4)$ rendig fogjuk számolni, mert a további tagok $O(G_F^2)$ korrekciót adnának (5.2.22)-ben és (5.2.34)-ben.

$$D_{0,\mu,\mu\nu} \equiv \frac{1}{i\pi^2} \int d^4k \frac{1; k_\mu; k_\mu k_\nu}{a_1 a_2 a_3 a_4} \quad (G.1)$$

I. $\Sigma \rightarrow ne\bar{\nu}_e$

$$a_1 = (k + p_e)^2 - m_e^2 \quad q = p_i - p_f = p_e + p_1$$

$$a_2 = (k + q)^2 - M_w^2 \quad P_f^2 = m_f^2 \quad p_e^2 = m_e^2$$

$$a_3 = (k + p_i)^2 - m_i^2 \quad p_i^2 = m_i^2 \quad p_1^2 = 0$$

$$a_4 = k^2 - \lambda^2$$

(G.2)

Vezessünk be Feynman paramétereket

$$D_{0,\mu,\mu\nu} = \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz \frac{1}{i\pi^2} \int d^4k \frac{1; k_\mu; k_\mu k_\nu}{(m^2 - k^2 - 2kQ)^4} \quad (G.3)$$

$$Q = zp_e + (y-z)q + (x-y)p_i = -zp_1 - yp_f + xp_i \quad (G.4a)$$

$$m^2 = (M_w^2 - q^2)(y-z) + (1-x)\lambda^2 \quad (G.4b)$$

$$Q^2 = m_f^2 y^2 + m_i^2 x^2 - 2p_i p_f xy - 2p_1 p_i zx + 2p_1 p_f zy \quad (G.4c)$$

$$N \equiv m^2 + Q^2 \equiv ax^2 + by^2 + cxy + dx + ey + f + gz^2 + hxz + jyz + kz \quad (G.4d)$$

$$a = m_i^2; \quad b = m_f^2; \quad c = -2p_i p_f; \quad d = -\lambda^2; \quad e = -q^2 + M_w^2$$

$$f = \lambda^2; \quad g = 0; \quad k = -2p_1 p_i; \quad j = 2p_1 p_f; \quad h = q^2 - M_w^2 \quad (G.4e)$$

$$D_0 = \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz \frac{1}{N^2} \quad (G.5)$$

$$D_\mu = \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz \frac{-Q_\mu}{N^2} \equiv \frac{1}{M_w^2} [P_{1\mu} D_1 + p_{f\mu} D_2 + p_{i\mu} D_3] \quad (G.6)$$

$$D_{\mu\nu} = \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz \frac{Q_\mu Q_\nu}{N^2} - \frac{1}{2} \frac{g_{\mu\nu}}{N} = p_{1\mu} p_{1\nu} D_{11} + (p_{1\mu} p_{i\nu} + p_{1\nu} p_{i\mu}) D_{12} + \\ + (p_{1\mu} p_{f\nu} + p_{1\nu} p_{f\mu}) D_{13} + p_{i\mu} p_{i\nu} D_{22} + (p_{i\mu} p_{f\nu} + p_{i\nu} p_{f\mu}) D_{23} + p_{f\mu} p_{f\nu} D_{33} - g_{\mu\nu} D_{44}. \quad (G.7)$$

A fenti kifejezésekben a D függvények a következők:

$$\begin{aligned} \int &\equiv \int_0^1 dx \int_0^x dy \int_0^y dz; \quad D_0 = \int \frac{1}{N^2} \quad D_{44} = \frac{1}{2} \int \frac{1}{N} \\ D_1 &= \int \frac{z}{N^2} \quad D_{11} = \int \frac{z^2}{N^2} \quad D_{12} = \int \frac{-zx}{N^2} \\ D_2 &= \int \frac{y}{N^2} \quad D_{13} = \int \frac{yz}{N^2} \quad D_{22} = \int \frac{x^2}{N^2} \\ D_3 &= \int \frac{-x}{N^2} \quad D_{23} = \int \frac{-yx}{N^2} \quad D_{33} = \int \frac{y^2}{N^2} \end{aligned} \quad (D.8)$$

$O(1/M_w^4)$ rendig számolva az integrálok kiértékelhetők. Mivel csak D_0 IR divergens, ezért a többi függvény számolásakor $\lambda=0$ írható. Ebben a közelítésben tehát a következő kifejezéseket kapjuk:

$$D_0 = D_0^{IR} + D_0^v \quad (G.9)$$

$$D_0^{IR} = -\frac{1}{2(p_i - p_e)^2 (y_1 - y_2) M_w^2} \ln \frac{(y_1 - 1)y_2}{(y_2 - 1)y_1} \ln \frac{\lambda^2}{(p_i - p_e)^2} \quad (G.10)$$

$$D_0^v = \frac{1}{M_w^2} \int_0^1 dy \frac{\ln(y - y_1)(y - y_2)}{(y - y_1)(y - y_2)} \frac{1}{2(p_i - p_e)^2} \quad (G.11)$$

$$D_3 = -2D_{22} = -\frac{1}{M_w^2} \frac{1}{(p_i - p_e)^2 (y_1 - y_2)} \ln \frac{(1 - y_1)y_2}{(1 - y_2)y_1} \quad (G.12)$$

$$D_1 = D_2 = -2D_{23} = -2D_{12} = \frac{1}{M_w^2} \frac{1}{2(p_i - p_e)^2} \ln \frac{m_e^2}{m_i^2} - \frac{p_i(p_i - p_e)}{(p_i - p_e)^2} D_3 \quad (G.13)$$

$$D_{11} = D_{33} = D_{13} = \frac{1}{2(p_i - p_e)^2} \left[\frac{1}{M_w^2} + 2p_i(p_i - p_e)D_1 + m_i^2 D_3 \right] \quad (G.14)$$

$$D_{44} = \frac{1}{4M_w^2} \left[\ln \frac{M_w^2}{m_e^2} + \frac{3}{2} + y_1 \ln \frac{y_1 - 1}{y_1} + y_2 \ln \frac{y_2 - 1}{y_2} \right]. \quad (G.15)$$

y_1 és y_2 a következő másodfokú egyenlet gyökei:

$$(p_i - p_e)^2 y^2 - 2p_i(p_i - p_e)y + p_i^2 = 0. \quad (\text{G.16})$$

Ha ezeket a függvényeket visszairjuk (G.6) és (G.7)-be, akkor azt kapjuk, hogy

$$D^\mu = -p_e^\mu D_1 + p_i^\mu (D_3 + D_1) \quad (\text{G.17})$$

$$D^{\mu\nu} = p_e^\mu p_e^\nu D_{11} + p_i^\mu p_i^\nu \left(D_{11} - D_1 - \frac{1}{2} D_3 \right) + (p_i^\mu p_e^\nu + p_i^\nu p_e^\mu) \left(\frac{1}{2} D_1 - D_{11} \right) - g^{\mu\nu} D_{44} \quad (\text{G.18})$$

II. $A^0 \rightarrow pe\bar{\nu}_e$

Ebben az esetben (G.2)-ben annyi a változás, hogy

$$a_3 = (k - p_f)^2 - m_f^2. \quad (\text{G.19})$$

A (G.16) másodfokú egyenlet ekkor a következő

$$(p_f + p_e)^2 y^2 - 2p_f(p_f + p_e)y + p_f^2 = 0. \quad (\text{G.20})$$

Könnyű látni, hogy a két gyök

$$0 < y_1, y_2 < 1 \quad (\text{G.21})$$

tartományba esik. Emiatt (D.8)-ban a könnyen elvégezhető x és z integrálás után a visszamaradó y integráloknál [27]-ben leírt módszert kell alkalmazni az integrandusok pólusainak és vágásainak a megkerülésére.

A15 TÍPUSÚ SZUPRAVEZETŐK

BÁNKUTI JÓZSEF és KIRSCHNER ISTVÁN

Eötvös Loránd Tudományegyetem,
Alacsony Hőmérséklet Fizikai Tanszék,
Budapest

Az A15 típusú szupravezetők magas kritikus paramétereik miatt az utóbbi években a kutatás homlokterébe kerültek. A kiemelkedően nagy kritikus mágneses tér és kritikus áram értékek általában viszonylag magas kritikus hőmérsékletekkel társulnak, emiatt a számukra szükséges hőmérsékleti tartományok könnyen kezelhetők. Mindezek a kedvező tulajdonságok az A15-ös típusú szupravezetők széleskörű alkalmazási lehetőségeit biztosítják.

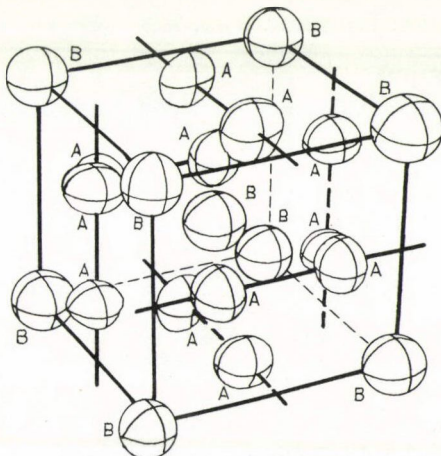
Érkezett 1982. júl. 8.

1. BEVEZETÉS

Az A15 típusú kristályszerkezetet 1931-ben *Hartmann és munkatársai* [1] fedezték fel és wolfram egyik új módosulatának, a β -W-nak tulajdonították. Az a későbbi feltételezés, miszerint az új szerkezet nem a wolframhoz tartozik, hanem a W_3O vegyületnek felel meg, nem állja meg a helyét, ugyanis kiderült, hogy bár az oxigénnek szerepe lehet a szerkezet stabilizálásában, de β -W rendkívül alacsony oxigénkoncentrációban is keletkezik [2]. A szerkezet mintapéldájának jelenleg inkább a Cr_3Si vegyületet tartjuk, amelyet az 1. ábra mutat.

Az ábrából látható, hogy az A_3B típusú szerkezetben a B(Si) atomok egy tércentrált köbös alrácsot alkotnak, melyben az A(Cr) atomok az oldallapokon három ortogonális láncban helyezkednek el.

Az A15 típusú szerkezet igazi karrierje 1954-ben kezdődött a magas kritikus hőmérsékletű szupravezető anyagok felfedezésével [3]. A legmagasabb kritikus hőmérsékletű anyagok azóta is mindig az ilyen típusú szerkezethez tartoznak. A jellemző átmeneti hőmérséklet 20 K közelében van. Egy 20 K feletti átmeneti hőmérséklet a szupravezetőknél perspektivikusan igen kedvező lehet, mivel a szupravezető állapot fenntartásához a folyékony hélium helyett esetlegesen a folyékony hidrogén is számításba vehető. Az A15 típusú ötvözeteknél az optimális szupravezető paraméterekhez kedvező szerkezeti stabilitás is



1. ábra

párosul. Mindezek a tulajdonságok minden bizonnyal ugyanarra az okra vezethetők vissza, az elektronszerkezetre, bár ugyanakkor meg kell említenünk, hogy nem minden A15 típusú vegyülethez tartoznak kristályszerkezetfüggő elektronszerkezeti sajátosságok.

Tudományos érdekességük mellett az A15 típusú szupravezetők technológiaiailag is igen fontosak. Már ma is ezek képezik a laboratóriumi nagy mágneses terű berendezések alapját és minden bizonnyal magukban rejtik a szupravezetés jövőbeni kiterjedt felhasználásának lehetőségét. Egy ilyen technológiai fejlődés elérésében azonban nemcsak a szupravezetők fizikája, hanem a fizikai metallurgia is jelentős szerepet fog játszani. Áttekintve az A15 típusú szupravezetők tulajdonságait és alkalmazási kilátásait, ez utóbbi szempontot mindig szem előtt kell tartanunk.

2. SZERKEZETI STABILITÁS

Szupravezető A15 típusú szerkezettel rendelkező ötvözetek fázisdiagramjai sajnos eléggé hiányosan ismertek a 2000 °C-t megközelítő kényelmetlen kísérleti körülményeknek köszönhetően. Pedig az A15 fázis stabilitási határainak pontos ismerete döntő fontosságú a szupravezető és normál állapotú tulajdonságok szempontjából.

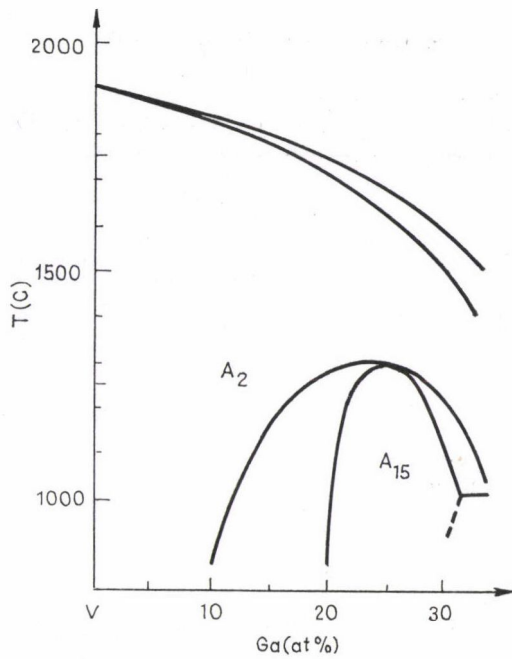
A feltehetően különböző kötési mechanizmusok miatt az ilyen típusú ötvözeteket két csoportba oszthatjuk. Az egyik csoportban mindkét komponens átmeneti fém, a másik csoportban csak az egyik, amelyik az ortogonális láncokat alkotja. Amíg az első csoport inkább úgy viselkedik, mint egy „elektronvegyület”, nem túlságosan érzékeny a pontos sztöchiometrikus összetételre, addig a második csoportban az ideális összetétel megközelítése fontosnak látszik.

Az állapotábrákat tekintve az összes eddig ismert rendszerek közül kettő, a Nb—Sn és a V—Ga tűnik a legkedvezőbbnek (2. és 3. ábra).

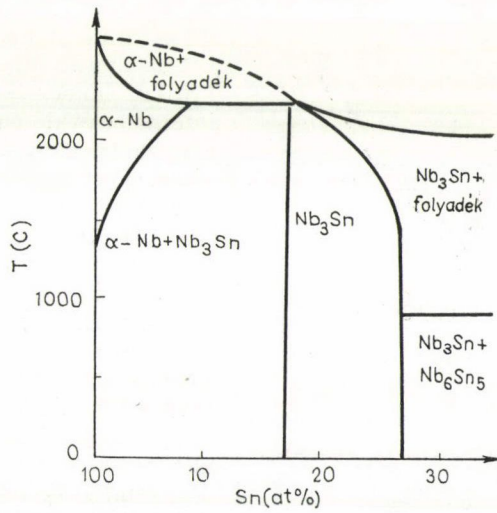
Mindkét rendszerben az ideális 25 %-os koncentráció környékén széles tartományban stabilis az A15 fázis.

A konkurens fázisok közül figyelembe kell vennünk az A2 típusú tércentrált szilárd oldatokat, amelyek mindig az alacsonyabb koncentrációtartomány felől határolják a kedvező A15 fázist, valamint a magasabb koncentrációk felől a tetragonális σ szerkezeteket, illetve az A_5B_3 típusú tetragonális szerkezeteket. Az általunk kíváncsi A_3B típusú kristályszerkezet keletkezését ezen fázisok egymáshoz viszonyított termodinamikai stabilitásai befolyásolják. Létezik még egy kristályszerkezet, melyet különösen magas hőmérsékleteken és főleg a Nb_3Si ötvözetnél kell figyelembe vennünk, a Ti_3P típusú tetragonális komplex szerkezet. A vizsgálatok azt mutatják, hogy bár van átfedés az A15 és Ti_3P kristályszerkezet szempontjából lényeges paramétereinek (atomméret arányok, elektronnegativitás különbségek) tartományai között, de a Ti_3P fázis nyomás, szennyezés stb. hatására nem megy át A15 fázisba. A fázis egyébként eléggé magas hőmérsékleten elbomlik, de mérsékelt sebességű kvencseléssel megőrződik.

Az egyedülálló fizikai tulajdonságok az A15 szerkezetről jórészt a három kristallográfiai értelemben független ortogonális láncnak köszönhetőek, azonban nyilvánvalóan figyelembe kell venni a láncot alkotó atomok és a tércentrált szerkezetet alkotó atomok közötti kölcsönhatásokat, valamint a láncok közötti kölcsönhatásokat is. Ez mindenképpen a kristályon belüli elektronsűrűség eloszlásának ismeretét követeli meg. Ilyen típusú mérések még csak néhány ötvözet esetén állnak rendelkezésünkre.



2. ábra



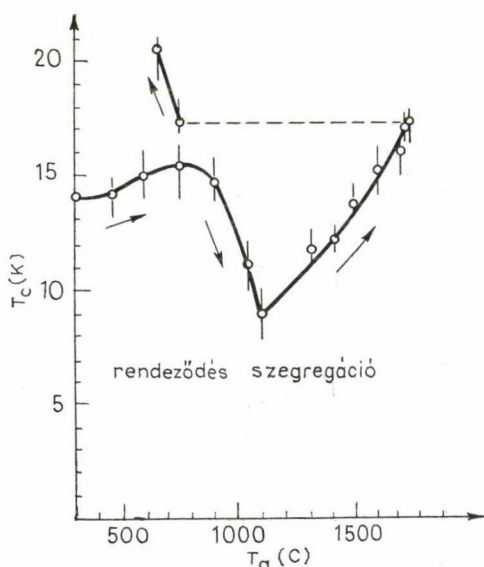
3. ábra

3. KRITIKUS HŐMÉRSÉKLET

A 69 ismert A15 típusú kristályszerkezettel rendelkező kétalkotós ötvözet közül 53 szupravezető és ebből 17 kritikus hőmérséklete meghaladja 10 K-t is. Az I. táblázat mutatja be ezeket az ötvözeteket.

I. TÁBLÁZAT

Ötvözet	Kritikus hőmérséklet (K)
Nb—Ge (film)	23
Nb ₃ Ga	20,7
Nb ₃ Al	19,1
Nb ₃ Sn	18
V ₃ Si	17,0
Nb—Si (film)	11—17
V—Sn (kvencselt)	7—17
Sb—Ge (kvencselt)	6—17
V ₃ Ga	15,9
Mo _{~65} Re _{~35} (film)	~15
Mo ₄₀ Tc ₆₀	13,4
Mo ₇₅ Os ₂₅	12,7
V—Al (film)	11,8
Nb _{~3} Au	11,5
Nb ₃ Pt	11
W _{~60} Re _{~40} (film)	11
V _{~3} Ge (film)	6—11



4. ábra

Ezekhez még hozzá kell vennünk az $(A_{1-x}A'_x)_3B$ és az $A_3(B_{1-x}B'_x)$ pszeudo-kétalkotós rendszereket is, amelyeknél a kritikus hőmérsékleteket általában a két határon levő kétalkotós ötvözet kritikus hőmérséklete közötti lineáris interpolációval kaphatjuk meg. Van azonban néhány kivétel is, ahol koncentráció függvényében egy relatív maximum tapasztalható. Ezek közül a Nb—Al—Ge és Nb—Au—Pt rendszerek magas kritikus hőmérséklettel, 20 K-nel, illetve 13 K-vel rendelkeznek.

A magas kritikus hőmérséklet kialakulását jelentősen befolyásolja a kristályszerkezetben jelenlevő hosszútávú rend. Általánosan kijelenthetjük, hogy a hosszútávú rend romlása az elektronszerkezet változásán keresztül csökkenti a T_c kritikus hőmérsékletét. A hosszútávú rendet három folyamat, a termikus, kompozíciós és a sugár-

zással indukált rendeződés vagy rend felbomlás alakítja ki, melyek közül az utolsót elhanyagolhatjuk. Az előző két rendeződési folyamat hatására jellemző példa a Nb—Ga A15 fázisa kritikus hőmérsékletének változása hőkezelés hőmérsékletének függvényében, amelyet a 4. ábra mutat [4]. Jól látható az ábrán a rendeződés T_c -t növelő, illetve a szegregáció T_c -t csökkentő hatása, ami után egy újabb rendeződési folyamat indul meg. Az eutektikus hőmérsékletről gyorsan kvencselt minták alacsony hőmérsékletű hőkezelése pedig egészen 20,7 K-ig növeli a kritikus hőmérsékletet.

A kritikus hőmérséklet és a normál állapotra jellemző paraméterek közötti ismert empirikus összefüggéseket [5—6] azok a legújabb vizsgálatok, amelyek ezen paraméterek és a rendeződési folyamatok kapcsolatának felderítését célozzák, megerősíteni látszanak. A vékony filmeknél, különösen a Nb_3Ge esetén a megfigyelt igen magas kritikus hőmérséklet is kétségtávan a viszonylagosan nagyfokú rendezettségnek köszönhető.

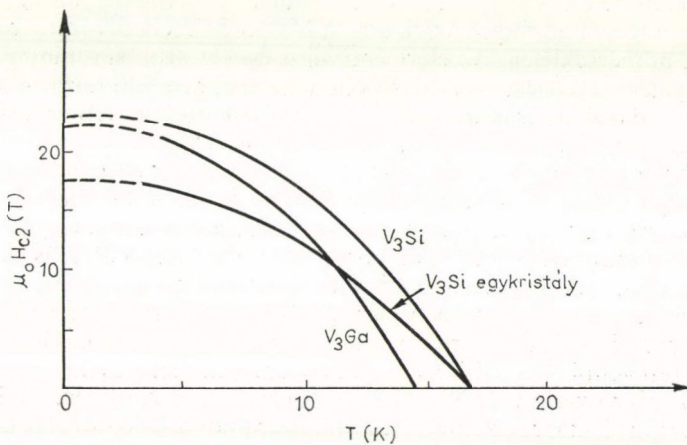
4. KRITIKUS MÁGNESES TEREK

A szupravezetők másik alapvetően fontos jellemző paramétere a kritikus mágneses tér, II. típusú szupravezetőkénél, amilyenek az A15 típusú szupravezetők is, különösen a második vagy felső kritikus mágneses tér, ameddig a szupravezető állapot megőrződik. A GLAG és BCS elmélet összekapcsolásával a H_{c2} második kritikus mágneses tér kiszámítható a kritikus hőmérséklet segítségével

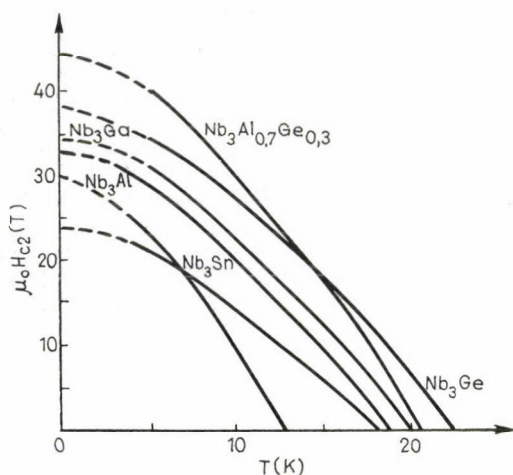
$$H_{c2}^2(0) = \text{konst } \varrho_0 \gamma T_c \quad (1)$$

ahol ϱ_0 a normál állapotú maradékellenállás, γ a Sommerfeld-féle elektronfajhő koeficiens. Látható, hogy a magas kritikus hőmérsékletű anyagok kritikus mágneses tere is magas.

V- és Nb-alapanyagú A15 típusú ötvözetekre a kísérletileg mért $H_{c2}(T)$ görbék az 5., illetve a 6. ábra mutatja. A kritikus mágneses tér értékeket, mint az az ábrákból is kitűnik, a fenti összefüggéssel nem lehet megadni. Többek között figyelembe kell



5. ábra



6. ábra

hordozni $8T$ mágneses térben [7]. Ez az áramérték ugyan messze van a szupravezetők kondenzációs energiájából becsülhető maximális áramkapacitástól, de ideális II. típusú szupravezetőknel az úgynevezett kevert állapotban, amikor a mágneses tér rácsszerűen elrendezett fluxusfonalak formájában behatol az anyagba, amely azonban még továbbra is szupravezető marad, egyáltalán nem képzelhető el transzport áram. Ugyanis ilyenkor a fluxusfonalak disszipatív mozgásba kezdenek és ez a szupravezető állapot megszűnéséhez vezet. A fluxusfonal rács és az anyag szerkezeti tökéletlenségei, hibái közötti kölcsönhatásnak köszönhető, hogy mégis létezik kritikus áram. Ily módon egy szupravezető anyag kritikus áram karakterisztikái inkább metallurgiai állapotától, mint a T_c és H_{c2} termodinamikai paramétereitől függenek, bár ezek kedvező volta előfeltétele a nagy kritikus áramsűrűség elérhetőségének.

Jelenleg a legtöbb kritikus áram adat a Nb_3Sn és V_3Ga ötvözetekről van és általában $4,2 K$ hőmérsékleten. Az elért áramsűrűségeket azonban mindig az előállítási technika figyelembevételével kell kiértékelnünk. Szupravezető huzalok készítésénél a szupravezető adatokat természetesen ki kell egészítenünk egyéb szükséges információkkal (mechanikai tulajdonságok, tranziens jelenségek stb.).

A 7. ábrán egy tipikus kritikus áram — mágneses tér görbesereget mutatunk be kis mennyiségű Ga-ot tartalmazó Nb_3Sn ötvözet esetén $4,2 K$ -en [8].

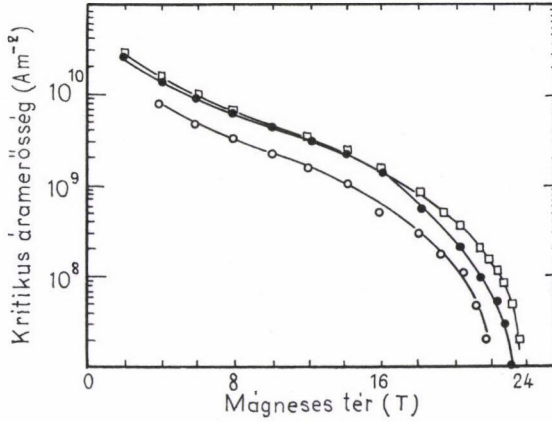
A J_c kritikus áramsűrűség meghatározásában a legtöbb pontatlanságot magában foglaló tényező a szupravezető áramot hordozó és általában diffúziós úton előállított réteg vastagsága. Nb_3Sn esetén a maximális áramsűrűség néhányszor $10^6 A/cm^2$. V_3Ga ötvözetnél alacsony terekben elérhető $10^7 A/cm^2$ áramsűrűség is, de még $13T$ mágneses térben is $10^6 A/cm^2$ érték kapható. Ezen a két anyagon kívül potenciálisan számításba kell venni nagy kritikus mágneses tere miatt az Nb_3Ge ötvözetet is, illetve a megfelelő mikroszerkezetű Nb_3Al és a $Nb_3(Al-Ge)$ rendszereket is.

Egy II. típusú szupravezetőben a kritikus áramot a fellépő $J \times B$ Lorentz típusú erő és az F_p maximális úgynevezett pinning erő egyenlősége adja meg. A pinning erők rögzítik a fluxusfonalakat elmozdulás ellen. *Kramer* elméleti modellje [9] alapján

venni még azt is, hogy a spin paramágnesség miatt a második kritikus mágneses térre létezik egy paramágneses határ, amely alacsony hőmérsékleteken jelentősen csökkenti H_{c2} értéket, bár ezt a hatást némileg ellensúlyozza a spin-pálya kölcsönhatás. Az ábrákból az is kitűnik, hogy ez a csökkenés Nb-alapú ötvözeteknél nem észrevehető, de V-alapú ötvözeteknél meglehetősen jól látható.

5. KRITIKUS ÁRAM

Az A15 típusú szupravezetők igazi technikai jelentőségét attól kezdve számítjuk, amikor kiderült, hogy a II. típusú szupravezető Nb_3Sn ötvözet $10^5 A/cm^2$ áramot tud



7. ábra

kiszámítható az F_p pinning erő a $h = H/H_{c2}(T)$ redukált mágneses tér függvényében

$$F_p(h) = K_s \cdot h^{1/2}(1-h)^2 \quad (2)$$

illetve, ha figyelembe vesszük $K_s = \text{konst} \cdot H_c^2 \cdot H_{c2}^{1/2}$ konkrét alakját, akkor

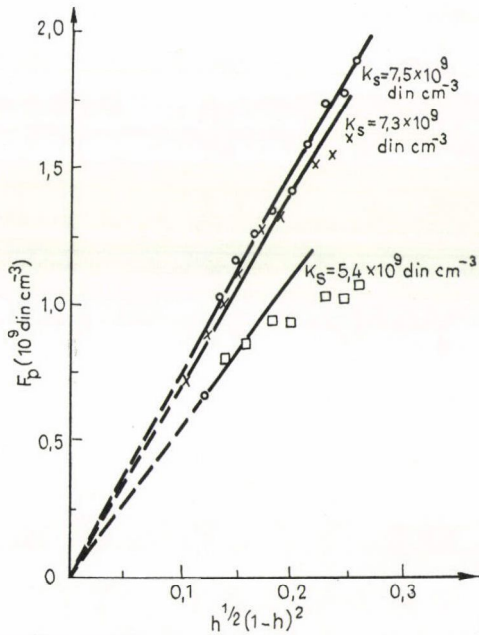
$$F_p(h) = H_{c2}^n f(h) \quad (3)$$

ahol jelen modell alapján $n=5/2$. Nb_3Ge ötvözet esetén a 8. ábra jól mutatja a (2) összefüggést különböző mintákon.

Természetesen, ha ismerni akarjuk a fluxusfonalakat rögzítő erőket, a rögzítő centrumok fizikai természetét is meg kell vizsgálni. Nb_3Sn és V_3Ga ötvözeteknél azt mondhatjuk, hogy a szemcsehatárok játszanak jelentős szerepet fluxusfonalak rögzítésében, de figyelembe kell venni a szemcseméreteket és a fonalak távolságát is.

6. PERSPEKTÍVÁK

Összefoglalva, tehát a homogén szupravezető anyagokat a (T, H, J) térben, ahol T a hőmérséklet, H a mágneses tér, J az áramsűrűség, egy kritikus felülettel lehet jellemzni. Az A15 típusú szupravezetőkre jellemző felületeket a T tengely mentén más anya-



8. ábra

gok nem múlják felül, legjobban a B1 típusú Nb-alapanyagú karbonitridek közelitik meg 18 K kritikus hőmérsékletükkel. A H tengely mentén az úgynevezett Chevrel fázisok, háromalkotós molibdénszulfidok múlják csupán felül az A15 ötvözeteket, de a kritikus hőmérsékletük és különösen az áramhordozó kapacitásuk eléggé alacsony. A kritikus áramok tekintetében is jelenleg az A15 típusú anyagok és különösen a V-alapú ötvözetek a legkedvezőbbek.

Mint szupravezető paraméterek tekintetében konkurens szerkezetű anyagot, a B1 típusú és a Chevrel fázisok mellett meg kell említenünk még a C15 típusú úgynevezett Laves fázisokat is, melyeknél a nem túl nagy áramkapacitás és a kissé alacsony kritikus hőmérséklet még 4,2 K-en is 20 T nagyságrendű második kritikus mágneses térrel párosul.

Befejezésül megállapíthatjuk, hogy jelenleg az A15 típusú szupravezető anyagok foglalják magukba a legkedvezőbb szupravezető tulajdonságokat, melyek közül T_c és H_{c2} elsősorban anyagfüggő, de a J_c kritikus áramsűrűség főként az előállítási technológia függvénye. Látható az is, hogy még egyik paraméter tekintetében sem értük el a maximális értékeket.

IRODALOM

1. Hartmann, H., Ebert, F., Bretschneider, O., Z. Anorg. Chem. 198, 116, 1931.
2. Morcom, W. R., Worell, W. L., Sell, H. G., Kaplan, H. I., Metallurg. Trans. 5, 155, 1974.
3. Matthias, B. T., Geballe, T. H., Geller, S., Corenzwit, E., Phys. Rev. 95, 1435, 1954.
4. Flükiger, R., Jorda, J. L., Solid St. Commun. 22, 109, 1977.
5. McMillan, W. L., Phys. Rev. 167, 331, 1968.
6. Allen, P. B., Dynes, R. C., Phys. Rev. B 12, 905, 1975.
7. Kunzler, J. E., Buchler, E., Hsu, F. S. L., Wernick, J., Phys. Rev. Lett. 6, 89, 1961.
8. Dew-Hughes, D., Suenega, M., J. Appl. Phys. 49, 357, 1978.
9. Kramer, E. J., J. Appl. Phys. 44, 1360, 1973.

ELEKTRO-HIDRODINAMIKAI HULLÁMOK NAGY INTENZITÁSÚ SZTATIKUS ELEKTROMOS TÉRBEN

WIRTH LAJOS

Jászberényi Tanítóképző Főiskola, Természettudományi Tanszék

Megvizsgáljuk a rugalmas hullámok terjedését erős, stationer külső elektromos térben levő folyékony dielektrikumokban. Megmutatjuk, hogy homogén külső erőtér hatására anizotrop módon megváltozik a hangsebesség, és megváltoznak a véges kiterjedésű közeg rezgésének sajátfrekvenciái. Megvizsgáljuk a külső tér inhomogenitásának hatását a hangterjedésre és a függelékben utalunk eredményeinknek a mágneses folyadékok hidrodinamikájában való alkalmazhatóságára.

Érkezett (revízió után) 1983. február.

1. Az alkalmazott modell leírása

A címben szereplő rugalmas hullámok vizsgálatában az alábbi — a közegre, az erőtérre, valamint a rezgések frekvenciájára és amplitúdójára vonatkozó — közelítéseket fogjuk alkalmazni:

1. A közeg homogén, ideális folyadék, amelynek a mozgását az Euler-egyenlet írja le, és ebben külső térfogati erőként csak a ponderomotoros erőt vesszük figyelembe. A homogenitás miatt a ρ sűrűség, az ε dielektromos állandó és az η telítési paraméter egyensúlyi értékére érvényes a

$$\nabla \varrho_0 = \nabla \varepsilon_0 = \nabla \eta_0 = 0 \quad (1)$$

feltétel.

2. A közeg töltésmentes dielektrikum, ezért

$$\nabla D = 0 \quad (2)$$

3. A dielektromos állandó és a telítési paraméter függetlenek a frekvenciától. (Ez a feltétel folyadékoknál néhány száz kHz-ig teljesül. [3])

4. Eltekintünk az elektrosztatikától, csak olyan eseteket vizsgálunk, amikor a

$\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \varrho}\right)_T$ és $\left(\frac{\partial \eta}{\partial \varrho}\right)_T$ deriváltak elhanyagolhatók.

5. A vizsgált oszcillációk kicsik, ezért a nyomás, a sűrűség, a dielektromos paraméterek és a térerősség pillanatnyi értéke felírhatók az egyensúlyi érték és egy időtől függő perturbációs tag összegeként. Az egyenletekben a kettő vagy több perturbáció szorzatát tartalmazó tagokat elhanyagoljuk.

6. Az elektromos tér kvázisztatikus, azaz

$$\nabla \times \mathbf{E} = 0. \quad (3)$$

Az elektromos tér megváltozása a sűrűségperturbációk következménye. (Ez a feltevés ~ 1 GHz-ig jogos. [3]),

2. A ponderomotoros erő és a hidrosztatikai egyensúly feltétele

Az irodalomból ismert [5], hogy a töltésmentes dielektrikumra sztatikus elektromos térben ható ponderomotoros erő sűrűsége a sztrikciós tag nélkül

$$\mathbf{f} = (\mathbf{P}\nabla)\mathbf{E} - \frac{1}{2}\nabla(\mathbf{E}\mathbf{P}). \quad (4)$$

Ez a kifejezés a vektoranalízis ismert azonosságainak és a (3)-nak a felhasználásával az

$$\mathbf{f} = \frac{1}{2}\mathbf{D}\nabla\mathbf{E} - \frac{1}{2}\mathbf{E}\times(\nabla\times\mathbf{D}) \quad (5)$$

alakra hozható.

A dielektromos eltolás és az elektromos térerősség vektorai között homogén, izotrop közegben $\sim 10^6$ V/m térerősségig lineáris kapcsolat áll fenn, ennél nagyobb térintenzitásoknál azonban már nemlineáris hatások is fellépnek [3]. Második közelítésben a

$$\mathbf{D} = (\varepsilon + \eta E^2)\mathbf{E} \quad (6)$$

összefüggés használható, ahol ε a közel zérus erősségű térben mért dielektromos állandó, η pedig a telítési paraméter. A dielektromos eltolás (6)-beli értékét (5)-be helyettesítve, és a (2) feltételt figyelembe véve felírhatjuk a ponderomotoros erőt a térerősség és az anyagi jellemzők segítségével. Az alkalmazott közelítésben:

$$\mathbf{f} = -\frac{1}{2}E^2\nabla(\varepsilon + \eta E^2). \quad (7)$$

A folyadékok hidrosztatikai egyensúlyának feltételeit a kontinuitási egyenletből és a mozgásegyenletből nyerjük. Egyensúlyban $v=0$, így a kontinuitási egyenlet a

$$\frac{\partial \varrho_0}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

az Euler-egyenlet pedig a

$$\nabla p_0 = -\frac{1}{2}E_0^2\nabla(\varepsilon_0 + \eta_0 E_0^2) \quad (9)$$

feltételt szolgáltatja. Ez utóbbi egyenlet rotációját véve azt kapjuk, hogy homogén dielektrikum sztatikus elektromos térben akkor lehet hidrosztatikai egyensúlyban, ha

$$\nabla E_0^2 \times \nabla(\varepsilon_0 + \eta_0 E_0^2) = 0. \quad (10)$$

3. Az elektro-hidrodinamika linearizált egyenletrendszere

Abban a közelítésben, amelyet az 1. pontban felvázoltunk a kontinuitási egyenlet alakja:

$$\frac{\partial \varrho_1}{\partial t} + \varrho_0 \nabla \mathbf{v} = 0 \quad (11)$$

lesz, az Euler-egyenlet pedig így írható

$$\begin{aligned} \varrho_0 \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = & -\nabla p_1 - \frac{1}{2} E_0^2 \nabla \varepsilon_1 - \frac{1}{2} E_0^4 \nabla \eta_1 - \eta_0 E_0^2 \nabla (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_1) - \\ & - \frac{1}{2} \eta_1 E_0^2 \nabla E_0^2 - \eta_0 (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_1) \nabla E_0^2. \end{aligned} \quad (12)$$

Itt kihasználtuk, hogy a (3) feltételi egyenlet következményeként

$$\nabla \times \mathbf{E}_1 = 0. \quad (13)$$

A (2) feltételből további összefüggés adódik a térerősség perturbációjára, nevezetesen az

$$\begin{aligned} (\varepsilon_0 + \eta_0 E_0^2) \nabla \mathbf{E}_1 + (\varepsilon_1 + \eta_1 E_0^2) \nabla \mathbf{E}_0 + 2\eta_0 (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_1) \nabla \mathbf{E}_0 + \\ + \mathbf{E}_1 \eta_0 \nabla E_0^2 + \mathbf{E}_0 \nabla (\varepsilon_1 + \eta_1 E_0^2) + 2\mathbf{E}_0 \eta_0 \nabla (\mathbf{E}_0 \mathbf{E}_1) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

egyenlet.

A (11)–(14) egyenletrendszer nyolc egyenletet jelent tíz ismeretlen (a sebesség és a térerősség-perturbáció 3–3 komponense, valamint a nyomás, a sűrűség, a dielektromos állandó és a telítési paraméter perturbációi) számára. Az egyértelmű megoldáshoz szükséges további információkat kísérleti adatokból nyerjük. Figyelembe véve, hogy a hangterjedés adiabatikus folyamat, a nyomás és a dielektromos paraméterek megváltozását kifejezhetjük a sűrűség-perturbáció segítségével:

$$p_1 = \left(\frac{\partial p}{\partial \varrho} \right)_s \varrho_1 = c^2 \varrho_1 \quad (15)$$

$$\varepsilon_1 = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial \varrho} \right)_s \varrho_1 = g \varrho_1 \quad (16)$$

$$\eta_1 = \left(\frac{\partial \eta}{\partial \varrho} \right)_s \varrho_1 = h \varrho_1 \quad (17)$$

alakban, ahol a jobb oldalon szereplő adiabatikus deriváltak mérésekből meghatározhatók.

A (11)–(17) egyenletek alkotják a nagy intenzitású, sztatikus elektromos térben levő folyékony dielektrikumok kisamplitúdójú rugalmas hullámainak egyenletrendszerét.

4. Hangterjedés homogén elektromos térben

Legyen az elektromos tér a közeg nyugalmi állapotában homogén. Ekkor a (11)–(17) egyenletrendszer megoldásai síkhullámok, amelyek előállíthatók egydimenziós hullámok szorzataiként, így elegendő az egyenletrendszer olyan megoldásainak vizsgálata, ahol valamennyi változó csak egyetlen koordináta függvénye.

Irányítsuk koordináta-rendszerünket úgy, hogy az x -tengely iránya essen egybe az elektromos tér irányával. Ekkor a (15)–(17) összefüggéseket figyelembe véve az

x -tengely mentén terjedő hullámokra (11)–(14)-ből az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$\frac{\partial \varrho_1}{\partial t} + \varrho_0 \frac{\partial v}{\partial x} = 0 \quad (18)$$

$$\varrho_0 \frac{\partial v}{\partial t} = -c^2 \frac{\partial \varrho_1}{\partial x} - \frac{1}{2} E_0^2 (g + h E_0^2) \frac{\partial \varrho_1}{\partial x} - \eta_0 E_0^2 E_0 \frac{\partial E_1}{\partial x} \quad (19)$$

$$\frac{\partial E_1}{\partial x} = -\frac{E_0 (g + h E_0^2)}{\varepsilon_0 + 3\eta_0 E_0^2} \frac{\partial \varrho_1}{\partial x} \quad (20)$$

A megoldásokat

$$\varrho_1 = \bar{\varrho} \exp [-i(\omega t - kx)]$$

$$v = \bar{v} \exp [-i(\omega t - kx)]$$

$$E_1 = \bar{E} \exp [-i(\omega t - kx)]$$

alakban keresve a hangtanból ismert

$$\omega^2 = u_{\parallel}^2 k^2 \quad (21)$$

diszperziós relációra jutunk, ahol az elektromos tér irányában terjedő rugalmas hullámok terjedési sebességének négyzetét az

$$u_{\parallel}^2 = c^2 + \frac{1}{2} E_0^2 (g + h E_0^2) \left(1 - \frac{2\eta_0 E_0^2}{\varepsilon_0 + 3\eta_0 E_0^2} \right) \quad (22)$$

kifejezés adja. Látható, hogy a tér irányában terjedő hullámoknál a hangsebesség megváltozik az elektromos tér nélküli esethez képest.

A homogén elektromos térre merőlegesen terjedő hullámokban viszont a (13) és (14) egyenletekből következően

$$\mathbf{E}_1 \equiv 0$$

és az ilyen hullámok terjedési sebességének négyzetére

$$u_{\perp}^2 = c^2 + \frac{1}{2} E_0^2 (g + h E_0^2) \quad (23)$$

adódik.

5. Dobozba zárt közeg sajátrezgései homogén térben

Ha \mathbf{E}_0 iránya egybeesik koordináta-rendszerünk x -tengelyének irányával, és az x -tengely egyben egy téglatest alakú edény egyik élének egyenese, a sűrűség-perturbációra felírt hullámegyenlet megoldását

$$\varrho_1 = R(x, y, z) \exp (-i\omega t)$$

alakban keresve R -re az

$$u_{\parallel}^2 \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + u_{\perp}^2 \left(\frac{\partial^2 R}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 R}{\partial z^2} \right) + \omega^2 R = 0 \quad (24)$$

egyenletet kapjuk.

A lehetséges állóhullámokat (24) megoldásai adják az

$$R(0, y, z) = R(a, y, z) = 0$$

$$R(x, 0, z) = R(x, b, z) = 0$$

$$R(x, y, 0) = R(x, y, c) = 0$$

peremfeltételek figyelembevételével, ahol a , b és c a téglatest éleinek hossza. Keressük (24) megoldását

$$R = R_0 \cos px \cos qy \cos rz \quad (25)$$

alakban, akkor azt kapjuk, hogy

$$p = \frac{l\pi}{a}$$

$$q = \frac{m\pi}{b}$$

$$r = \frac{n\pi}{c}. \quad (26)$$

Itt l , m és n tetszőleges egész számok. Figyelembe véve (26)-ot a sajátfrekvenciákat az

$$\omega^2 = u_{\parallel}^2 \frac{\pi^2 l^2}{a^2} + u_{\perp}^2 \pi^2 \left(\frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) \quad (27)$$

formula szolgáltatja. Vessünk egy pillantást u_{\parallel}^2 és u_{\perp}^2 kifejezésére! Ennek alapján világos, hogy a dobozba zárt folyadék rezgésének sajátfrekvenciái külső elektromos térben megváltoznak. Az azonos l , m , n számhármashoz tartozó módusok frekvenciái négyzetének különbségére a

$$\Delta\omega^2 = \frac{1}{2} E_0^2 (g + hE_0^2) \pi^2 \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) - \frac{\eta_0 E_0^4}{\varepsilon_0 + 3\eta_0 E_0^2} (g + hE_0^2) \frac{\pi^2 l^2}{a^2} \quad (28)$$

kifejezés adódik.

Mivel a sajátfrekvenciák eltolódásának mértékét (28) szerint a térerősség, valamint ε_0 és η_0 mellett ez utóbbiak g és h deriváltjai határozzák meg, a frekvencia-eltolódás kísérleti vizsgálata lehetőséget kínál g és h mérésére. Ezek ismerete pedig hasznos lehet azoknak az összefüggéseknek a feltárásában, amelyek az anyagszerkezeti adatok, valamint a makroszkopikus dielektromos jellemzők között állnak fenn.

6. Hangterjedés gyengén inhomogén elektromos térben

Mivel a (11)–(17) egyenletrendszer megoldása inhomogén elektromos tér esetében olyan matematikai nehézségeket támaszt, amelyek elfedik a megoldás fizikai tartalmát, érdekes megvizsgálni egy olyan egyszerű modellt, amelyre egyenlet-rendszerünk könnyen megoldható, és a megoldásból levonhatók bizonyos kvalitatív következtetések a külső tér inhomogenitásának következményeiről. Ennek megfelelően a következőkben egy egydimenziós hullámterjedési problémát fogunk megvizsgálni.

Legyen az elektromos tér x -irányú és gyengén inhomogén. Írjuk a térerősség egyensúlyi értékét

$$E_0 = A(1 - ax)$$

alakba, ahol feltételezésünk szerint $a \ll 1/\delta$, ahol δ valamilyen karakterisztikus hosszúság. Ekkor E_0 magasabb hatványaiban is elhanyagolhatjuk az a -ban elsőnél magasabb fokú tagokat. További egyszerűsítésként egyenleteinkben figyelmen kívül hagyjuk azokat a tagokat, amelyek az $a\eta_0$, $a\eta_1$ szorzatokat tartalmazzák.

Ebben a közelítésben az Euler-egyenlet így írható:

$$\epsilon_0 \frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{\partial p_1}{\partial x} - \frac{1}{2} A^2 (1 - 2ax) \frac{\partial \epsilon_1}{\partial x} - \frac{1}{2} A^4 \frac{\partial \eta_1}{\partial x} - A^2 \eta_0 \frac{\partial E_1}{\partial x} \quad (29)$$

míg a (13) egyenletből átrendezés után ez adódik:

$$\frac{\partial E_1}{\partial x} = -\frac{1}{\epsilon_0 + 3\eta_0 A^2} \left[A(1 - ax) \frac{\partial \epsilon_1}{\partial x} + A^3 \frac{\partial \eta_1}{\partial x} - Aa\epsilon_1 \right]. \quad (30)$$

Helyettesítsük be (30)-at (29)-be, majd képezzük az így kapott egyenlet x -szerinti és a kontinuitási egyenlet t -szerinti deriváltját. Ezekből v -t kiküszöbölve (30), valamint (15), (16) és (17) behelyettesítésével a

$$\frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial t^2} = (B - Dx) \frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial x^2} + D \frac{\partial \varrho_1}{\partial x} \quad (31)$$

hullámegyenletet kapjuk, ahol bevezettük a

$$B = c^2 + \frac{1}{2} \left(A^2 g + A^4 h - \frac{\eta_0 (2A^5 h + A^3 g)}{\epsilon_0 + 3\eta_0 A^2} \right) \quad (32)$$

$$D = A^2 ag \quad (33)$$

jelöléseket.

Hasonlítsuk össze (31)-et a (18)–(20) egyenletekből nyerhető

$$\frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial t^2} = u^2 \frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial x^2} \quad (34)$$

egyenlettel, amely homogén térben érvényes. A külső tér inhomogenitásának két lényeges, szorosan összefüggő következményét olvashatjuk ki az összehasonlításból:

1. Inhomogén térben a ϱ_1 x -szerinti második deriváltjának az együtthatója függ x -től, azaz a hangsebesség függ a helytől.
2. A (31) egyenlet jobb oldalán az x szerinti első derivált is szerepel, ezért az amplitúdó is függ a helytől.

Inhomogén külső elektromos tér hatására tehát a hanghullámok terjedési sebessége és amplitúdója változik, a terjedés irányától függően a hullám szétfolyik, vagy összesűrűsödik. Keressük (31) megoldását

$$\varrho_1 = R(x) \exp(-i\omega t) \quad (35)$$

alakban, ekkor R -re a

$$(B-Dx) \frac{d^2 R}{dx^2} + D \frac{dR}{dx} + \omega^2 R = 0 \quad (36)$$

egyenletet kapjuk. A (37) x megfelelő transzformációjával Bessel-típusú egyenletté alakítható [4], amelynek a megoldását az x változó visszahelyettesítésével így írhatjuk:

$$R = c_1 (B-Dx)^{\frac{n}{2}} I_n \left(2 \sqrt{\frac{\omega^2}{D^2} (B-Dx)} \right) + c_2 (B-Dx)^{\frac{n}{2}} Y_n \left(2 \sqrt{\frac{\omega^2}{D^2} (B-Dx)} \right). \quad (37)$$

Itt $n=0, 1, 2, \dots$ és I_n , valamint Y_n a megfelelő Bessel-függvények. A sűrűségperturbáció ismeretében p_1 , ε_1 , η_1 a (15)–(17) összefüggésekből, míg E_1 a (30) egyenlet integrálásával határozható meg.

A hangsebesség helyfüggése azt eredményezi, hogy ha a mozgás nem a térerősség négyzete gradiensének irányában történik, a sebesség rotációja nem tűnik el. Geometriai akusztikai közelítésben ilyenkor azt kapjuk, hogy a hangsugarak elhajlanak a felé a tartomány felé, ahol a hangsebesség kisebb [6]. Az elhajlás mértékére az

$$\frac{1}{R} = -\frac{1}{u} \mathbf{N} \nabla u \quad (38)$$

kifejezés adódik, ahol R a görbületi sugár, \mathbf{N} a főnormális irányába mutató egységvektor és

$$u = \left[c^2 + \frac{1}{2} E_0^2 (g + h E_0^2) - \frac{2\eta_0 E_0^2}{\varepsilon_0 + 3\eta_0 E_0^2} \frac{k_x^2}{k^2} \right]^{1/2}. \quad (39)$$

A geometriai akusztikán túlmenő közelítésekkel és a hullámterjedés stabilitásának kérdésével e helyütt nem foglalkozunk.

Összefoglalás

A dolgozatban megmutattuk, hogy a sztatikus elektromos térben levő szigetelő folyadék a hangterjedéssel szemben anizotroppá válik, és ezzel összefüggésben megváltoznak a véges kiterjedésű közeg rezgésének sajátfrekvenciái. Ez a frekvenciaeltolódás lehetőséget kínál a dielektromos jellemzők mérésére. Megvizsgáltuk a külső elektromos tér inhomogenitásának hatását a hangterjedésre, és a függelékben utalunk az elektro-hidrodinamikai és a ferrohidrodinamikai hullámjelenségek kapcsolatára.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton is szeretnék köszönetet mondani dr. Abonyi Ivánnak a probléma felvetéséért és a munkám során nyújtott támogatásáért.

FÜGGELÉK

Ferrohidrodinamikai hullámok sztatikus mágneses térben

A sztatikus elektromos és mágneses jelenségek analógiája és az alapegyenletek izomorfizmusa következtében kézenfekvő, hogy mindaz, amit a korábbiakban a szigetelő folyadékokról mondtunk, megfelelő átjelölések után érvényes a sztatikus mágneses térben levő ferromágneses folyadékok hidrodinamikájában is, ha a külső tér örvénymentes, és alkalmazható a

$$\mathbf{B} = (\mu + \nu H^2) \mathbf{H} \quad (\text{F.1})$$

közelítés. Itt μ és ν az anyag mágneses viselkedését jellemző (ε -nal és η -val analóg) paraméterek. Így például homogén mágneses térben a közeg sajátfrekvenciáinak a megváltozását a (28)-cal analóg:

$$\Delta \omega^2 = \frac{1}{2} H_0^2 (g + h H_0^2) \pi^2 \left(\frac{l^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{n^2}{c^2} \right) - \frac{\eta_0 H_0^4}{\mu_0 + 3\nu_0 H_0^2} (g + h H_0^2) \frac{\pi^2 l^2}{a^2} \quad (\text{F.2})$$

összefüggés adja meg, ahol most

$$g = \left(\frac{\partial \mu}{\partial \varrho} \right)_s$$

$$h = \left(\frac{\partial \nu}{\partial \varrho} \right)_s$$

Ezt azért érdemes kiemelni, mert módszert kínál a folyadékok makroszkopikus mágneses jellemzőinek homogén térben való mérésére.

Ha a külső mágneses tér nem örvénymentes, a közegre ható ponderomotoros erő sűrűsége a sztrikciós tag nélkül

$$\mathbf{f} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \nabla H + \mathbf{H} \times (\nabla \times \mathbf{H}) + \frac{1}{2} \mathbf{H} (\nabla \times \mathbf{B}) - \frac{1}{2} \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{H})$$

alakba írható. A jobb oldali harmadik és negyedik tag felléptének az a következménye, hogy a szigetelő folyadékokhoz képest egy újfajta hullám is megjelenik, nevezetesen az, amelyik a térerősségre merőlegesen, a térerősség négyzete gradienseinek irányában terjed. Ezt a hullámtípust is a legegyszerűbb közelítésben vizsgáljuk meg, az 1. pontban vázoltakkal analóg közelítésben.

Legyen a mágneses tér x -irányú és

$$\begin{aligned} H_x &= G(1 - ay) \\ H_y &= H_z = 0. \end{aligned} \quad (\text{F.3})$$

Ekkor a térerősség négyzetének gradiense y irányú, és

$$\frac{\partial H^2}{\partial y} = -2G^2 a. \quad (\text{F.4})$$

Olyan egydimenziós hullámokat vizsgálunk, amelyekben valamennyi változó egyedül az y -koordináta függvénye. Könnyen igazolható, hogy ekkor a

$$\nabla \times \mathbf{H}_1 = 0$$

és a

$$\nabla \mathbf{B} = 0$$

feltételekből

$$\mathbf{H}_1 \equiv 0$$

következik, vagyis a hidrodinamikai és anyagi változók perturbációja nem jár együtt a mágneses tér megváltozásával. Esetünkben a kontinuitási egyenlet

$$\frac{\partial \varrho_1}{\partial t} + \varrho_0 \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (\text{F.5})$$

míg az Euler-egyenlet

$$\varrho_0 \frac{\partial v}{\partial t} = -(A - By) \frac{\partial \varrho_1}{\partial y} + (D - Ey) \varrho_1 \quad (\text{F.6})$$

alakú lesz, ahol

$$A = c^2 + \frac{G^2 g}{2} + \frac{G^4 h}{4}$$

$$B = G^2 ag + 2G^4 a^2 h$$

$$D = \frac{Gag}{2} (G+1) + \frac{G^3 ah}{2} (3G+1)$$

$$E = \frac{Ga^2 g}{2} (G+1) + \frac{G^3 a^2 h}{2} (7G+3).$$

A kontinuitási és az Euler-egyenletből a sűrűség perturbációjára a

$$\frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial t^2} = (A - By) \frac{\partial^2 \varrho_1}{\partial y^2} - (B + D - Ey) \frac{\partial \varrho_1}{\partial y} + E \varrho_1 \quad (\text{F.7})$$

hullámgyenlet vezethető le. Ha ennek a megoldását

$$\varrho_1 = R(y) \exp(i\omega t)$$

alakban keressük, R -re az

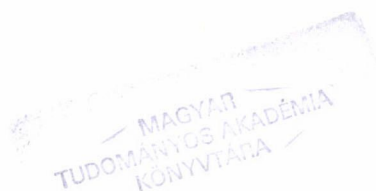
$$(A - By) \frac{d^2 R}{dy^2} - (B + D - Ey) \frac{dR}{dy} + (E + \omega^2) R = 0 \quad (\text{F.8})$$

egyenletet kapjuk, amely megfelelő transzformációval Whittaker-egyenletté alakítható [4]. Így (F.8) általános megoldása két elsőfajú Whittaker-függvény lineár-kombinációjaként állítható elő.

IRODALOM

1. Nagy Károly: Elektrodinamika. Tankönyvkiadó. Budapest, 1968.
2. Novobátzky—Neugebauer: Elektrodinamika és optika. Tankönyvkiadó. Budapest, 1952.
3. Liszi János: Nemelektrolit folyadékok dielektromos tulajdonságai. A kémia újabb eredményei, 38. köt. Akadémiai kiadó, 1977.
4. Csugajevszkij: Magnyitogravitacionnűje kolebanyija i volnű. Red.-izd. o. Akad. Nauk Mold. SZSZR., 1971.
5. Marx—Györgyi: Acta. Phys. 3, 213, 1954.
6. Landau—Lifsic: Hidrodinamika, Tankönyvkiadó, 1980.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1983. április 28. — Terjedelem: 7,35 (A/5 ív)
84-1962 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató



Ára: 15 Ft
Előfizetés kötetenként: 90 Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Margaritisz Tanaszisz: Magasabb rendű sugárzási korrekciók számolása hyperonok β-bomlásához a Glashow—Weinberg—Salam elméletben</i>	105
<i>Bánkúti József és Kirschner István: A15 típusú szupravezetők</i>	171
<i>Wirth Lajos: Elektro-hidrodinamikai hullámok nagy intenzitású sztatikus elektromos térben</i>	179

307 226

7

W.

MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

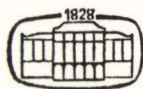
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KRITIKUS JELENSÉGEK SZTATIKÁJÁNAK ÉS DINAMIKÁJÁNAK VIZSGÁLATA A RENORMALIZÁCIÓS CSOPORT SEGÍTSÉGÉVEL*

FORGÁCS GÁBOR

MTA Központi Fizikai Kutató Intézete, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

I. Bevezetés, irodalmi áttekintés	189
II. A renormalizációs csoport sztatikus esetben	193
III. A Migdal-féle renormalizációs csoport	196
a) Ising-modell	199
b) n vektor modell (általánosított Heisenberg-modell)	200
IV. A Migdal-féle módszer általánosítása folytonos szimmetriájú spinrendszerek esetén	201
a) A harmonikus rotátor $d=2$ esetén	201
b) Az n vektor modell $d=2$ és $d=2+\varepsilon$ dimenzió esetén	206
V. A Migdal-féle eljárás alkalmazása dinamikus kritikus viselkedés tárgyalására	210
a) A kinetikus Ising-modell	211
b) A Potts-modell	217
c) Az inhomogén Ising-modell és az Ising-spin üveg	220
VI. Összefoglalás	225
Irodalom	227

I. BEVEZETÉS

Midőn egy rendszer fázisátalakuláson megy keresztül, fizikai tulajdonságaiban ugrásszerű változások, diszkontinuitások jelentkeznek. Ezeknek a változásoknak a vizsgálata, megértése hosszú évek óta foglalkoztatja a terület kutatóit. Viszonylag korán sikerült felismerni, hogy a diszkontinuitások a rendszert felépítő mikroszkopikus összetevők közötti kölcsönhatások következményei, de a jelenségek pontos leírása, a statisztikus mechanika segítségével rendkívül nehéznek bizonyult.

A fázisátalakulások és ezen belül a kritikus jelenségek vizsgálatának korai szakaszában, vagyis a múlt század második felében és a huszadik század első részében fenomenologikus elméletek születtek, melyek viszonylag jól leírták a diszkontinuitásokat. Ilyenek voltak a *Van der Waals*-féle elmélet folyadék folyadék—gáz átmenet leírására [1], vagy a különböző átlag tér közelítések, mint a *Bragg—Williams* [2], *Bethe* [3], *Peierls* [4] közelítések és a *Landau*-elmélet [5].

A fázisátmenetek vizsgálatának modern szakaszát 1944-től számíthatjuk, amikor is *Onsager*nek [6] sikerült egzakt statisztikus mechanikai számolást végeznie egy egyszerű kölcsönható spin rendszerre, a két dimenziós Ising-modellre. A megoldás azt mutatta, hogy a korábbi, „klasszikus” elméletek kvantitatív jóslataikban megbízhatatlanok. *Onsager* munkája óriási lökést adott a kritikus pont körüli viselkedés további tanulmányozásához. A hőmérsékleti sorfejtések segítségével [7—13]

* Kandidátusi értekezés. Érkezett: 1982. szeptember 2.

számos kritikus viselkedést mutató rendszerre sikerült kvantitatív kijelentést tenni, méghozzá fantasztikus pontossággal.

A kritikus pont (mint például a ferromágnesek Curie-pontja, az antiferromágnesek Néel-pontja, vagy a hélium λ pontja) körül a rendszer egyes mikroszkopikus összetevői közötti kapcsolat, korreláció egyre erősebbé, kiterjedtebbé válik. Hogy ez a korreláció mennyire terjed ki a rendszerben azt a korrelációs hossz adja meg, mely definíciója szerint végtelenné válik a kritikus pontban. Ez a tény volt az, mely Kadanoff-ot arra ösztönözte, hogy a kritikus viselkedést a skálainvariancia oldaláról próbálja megközelíteni [14–17]. Az általa kidolgozott blokksema és az ennek természetes leírására használt homogén függvények segítségével sikerült, fenomenologikus úton, egyszerű összefüggéseket kapnia az úgynevezett kritikus indexek között, melyek az egyes fizikai mennyiségek szingularitásának mértékére jellemzők a kritikus pont közelében [15, 16]. Ezek az összefüggések a skálátörvények, melyeket a kísérleti eredmények is igazolnak [15, 16]. Ugyancsak Kadanoff mutatott rá egy igen érdekes jelenségre, nevezetesen arra, hogy a kritikus pont körüli viselkedésbe néhány fundamentális mennyiségen kívül (ilyenek a rendparaméter komponenseinek száma, a rendszer dimenziója, a kölcsönhatás hatótávolsága, illetve dinamikus kritikus jelenségek leírásánál a megmaradási törvények száma) semmiféle egyéb mennyiség nem szól bele. Ezt a gondolatot nevezzük univerzalitásnak [16], mely egyben megmagyarázza, miért tapasztalunk ugyanolyan kritikus viselkedést különböző rendszerekben, mint például bizonyos ferromágnesekben és héliumban.

A Kadanoff-féle elmélet [17], nagyszerű eredményei mellett rendelkezik bizonyos hátrányokkal is. Így, lévén fenomenologikus elmélet, nem adhat mikroszkopikus magyarázatot a kritikus pontban fellépő diszkontinuitásokra, továbbá nem lehet segítségével a kísérleti szempontból oly fontos kritikus indexek számértékét megadni.

Mindezek a kérdések és problémák megoldást nyernek a *Wilson* által kidolgozott renormalizációs csoport módszer (a továbbiakban RCSM) segítségével [18, 19]. Az RCSM kiindulópontja az a felismerés, hogy a kritikus pontbeli fluktuációknak nincs karakterisztikus hossza. A lényeges fluktuációk hullámhossza az atomok közötti távolságoktól a korrelációs hosszra terjed, mely a kritikus pont közelében sokkal nagyobb, mint az atomok közötti átlagos távolság. Így nem meglepő, hogy azok a fizikai mennyiségek, melyek ezen fluktuációk felösszegezésének eredményeként adódnak (mint a fajhő, a szuszeptibilitás) divergálnak a kritikus pontban.

Az RCSM következő részét azon módszerek képezik, melyek segítségével az előbb említett divergens mennyiségek matematikailag kezelhetők. Ez a probléma *Wilson* előtt is felmerült és valójában az RCSM-et korábban már alkalmazták a kvantum elektrodinamikában fellépő divergens Feynman-gráfok kezelésére [20, 21]. Sőt, *Fowler* és *Zawadowszki* [22], valamint *Abrikosov* és *Migdal* [23] az RCSM egy speciális változatát, a *Gell-Mann* és *Low*-formalizmust [21] a Kondo-problémára, míg *Di Castro* és *Jona Lasinio* [24] általános kritikus viselkedést mutató rendszerek leírására alkalmazták. Az RCSM *Wilson*-féle változata azonban sokkal általánosabb, mint a korábbi módszerek és ennek segítségével sikerült először a kritikus indexekre konkrét számértékeket kapni.

Az RCSM iteratív eljárás. A rendkívül sok szabadsági fokot tartalmazó rendszert iteratív módon véges számút tartalmazóra redukálja. Az iterációt végezhetjük impulzus térben vagy a fizikai, valós térben. Az első esetben a konkrét számolás az ε vagy $1/n$ sorfejtés segítségével történhet. Itt ε valamilyen speciális dimenziószámától való eltérést jelentheti. A speciális dimenziószámot az tűnteti ki, hogy annál

a rendszer viselkedése viszonylag könnyen leírható. Így az $\varepsilon=4-d$ (d a rendszer dimenziója) sorfejtés azért célszerű, mert a φ^4 -es térelmélettel modellezhető rendszereknél [25], $d=4$ -nél az átlagos tér közelítés egzaktta válik. Az ilyen dimenziószámot felső kritikus dimenziónak nevezzük. Folytonos spinrendszerek esetén $\varepsilon=d+2$ is hasznosnak bizonyult [26, 27], ugyanis $d=2$ -nél az ilyen rendszerekben a kritikus hőmérséklet zérus [28]. Azt a dimenziószámot, melynél a kritikus hőmérséklet (vagy az ennek megfelelő paraméter) értéke zérus, alsó kritikus dimenziónak nevezzük.

Az $1/n$ sorfejtés a rendparaméter n komponensének inverze szerint történik [29]. Az ε és $1/n$ sorfejtés segítségével, az RCSM konkrét realizálását jelentő mód-szereken keresztül (Wilson-féle nem teljes integrálási elmélet (incomplete integration theory) [18]), vagy közelítő rekurziós egyenletek [18], Callan—Symanzik-egyenlet [25, 30, 31], Gell-Mann és Low-féle eljárás [32, 33], Langevin-egyenlet dinamikus kritikus viselkedésre [34]) számos olyan problémát sikerült kvantitatíve megvizsgálni, amire a korábbi „klasszikus” elméletekkel nem volt mód. Így vizsgálni lehetett az anizotrópia szerepét [35], a dipól kölcsönhatást [36—38], a szimmetriák szerepét [35, 39], a különböző anomális dimenziószámokat [25, 40], meg lehetett explicite konstruálni az állapotegyenletet [41, 42] és tárgyalni lehetett a dinamikai kritikus viselkedés szempontjából oly fontos megmaradási törvények szerepét [34]. Impulzus térbeli renormálás esetén (ε és $1/n$ sorfejtések) az eljárás önkény-mentes, egyértelműen definiált. Sokszor nem lehet azonban meghatározni a kritikus hőmérséklet számszerű értékét (a kritikus indexekét igen), vagy nem lehet általános fázisdiagramokat konstruálni.

Az impulzus térbeli renormálás eme hiányosságai könnyen pótolhatók a valós térbeli, RCSM segítségével. A valós térbeli RCSM esetében az iterálás a koordináta (valós) térben történik *Niemeijer és van Leeuwen* [43] voltak azok, akik a valós térbeli RCSM-et kidolgozták és azt diszkrét spin modellekre (Ising-modell) először alkalmazták. A Kadanoff-féle blokksema a valós térbeli RCSM-ben jelentkezik legszemléletesebben. Nemlineáris transzformáció segítségével blokkspineket definiálunk, majd perturbációszámítással (kumuláns és klaszter sorfejtések [43] vizsgáljuk a blokkspineket közötti kölcsönhatást. Blokkspineket azonban sokféleképpen lehet definiálni és ezért a valós térbeli RCSM nem egyértelmű, sokszor ad hocnak is tűnik. A különböző valós térbeli RCSM-ek éppen a blokkspineket megválasztásában különböznek egymástól. A valós térbeli RCSM nagy előnye, hogy viszonylag bonyolult fázisdiagramok is vizsgálhatók, illetve jósolhatók segítségével. A *Niemeijer és van Leeuwen*-módszert, mely tehát egy speciális valós térbeli RCSM, sikeresen alkalmazták mint sztatikus [43], mint dinamikus [44—46] kritikus jelenségek vizsgálatára. Ennek és más (Kadanoff-féle variációs módszer [47, 48]) valós térbeli RCSM-nek egy hátránya, hogy nyilvánvaló módon nem általánosíthatók folytonos spinrendszerekre. *Migdal*nak [49, 50] sikerült olyan valós térbeli RCSM-et kidolgoznia, mely folytonos spinrendszerekre is alkalmazható. A *Migdal*-féle eljárás nagy előnye egyszerűségében rejlik. *Migdal* a nemlineáris, funkcionális rekurziós egyenleteknek olyan egyszerű, közelítő megoldását írja fel, mely rendkívül bonyolult rendszerek esetén is használható és az esetek többségében kvalitatíve helyes fázisdiagramokra vezet [51]. Ez a megoldás, bizonyos esetekben, amikor a vizsgált rendszer duálisan invariáns (két dimenzióban négyzetrácson vizsgált spinrendszerek) a kritikus pontra egzakt értéket ad (például a négyzetrácson vett Ising-modell kritikus hőmérsékletére [49] és perkoláció kritikus valószínűségére [52]). A kritikus

indexek számértékei viszont, éppen az egyszerűség miatt nem túl megbízhatóak. Az eredeti Migdal-féle eljárás nem tekinthető egy szisztematikus perturbációs számítás nulladréndjének sem [53]. Kadanoff [54] kimutatta, hogy a Migdal-féle egyenletek „potenciáltolással” is megkaphatók és ebben a megfogalmazásban Menottinak és Parisinak sztatikus esetre már sikerült szisztematikus perturbációs számítást szerkesztenie [55].

Jelen dolgozatban az eredeti Migdal-módszer általánosításával kívánunk foglalkozni. A dolgozat IV. fejezetében a Migdal-egyenlet eredeti (Migdal által megadott) közelítő megoldásának ismertetése után, olyan módszert mutatunk be, melynek segítségével a Migdal-egyenlet egy másik közelítő megoldása származtatható. Módszerünk ugyanakkor szisztematikus közelítését jelenti az egyenlet megoldásának. Módszerünket a két dimenziós harmonikus rotátorra [53] és a $2+\varepsilon$ dimenziós $O(n)$ szimmetrikus vektor modellre alkalmazzuk [56]. A dolgozat V. fejezetében az eredeti Migdal-módszert a kritikus dinamika vizsgálatára általánosítjuk.

A kritikus dinamika a kritikus sztatikánál bonyolultabb. Ezért nem meglepő, hogy a kritikus dinamika átlagos tér elmélete csak 1954-ben készült el *van Hove* jóvoltából [16, 57]. Nem sokkal később született meg az Ising-modell Onsager-féle megoldásának dinamikai analogonja: *Glauber* egzaktul megoldotta a róla elnevezett spinmodell dinamikáját [58]. Ugyanúgy, ahogy a Landau-elmélet nem megbízható a kritikus sztatika leírására, a van Hove elmélet sem ad kvantitatíve helyes eredményeket.

Kritikus dinamika esetén a rendszerben fellépő fluktuációk nemcsak térben, de időben is divergálnak [15]. A fluktuációk élettartama a kritikus pontban végtelenné válik. Ezek a divergenciák a sztatikus divergenciákhoz hasonlóan kritikus exponensekkel írhatók le. A Kadanoff-féle skálahipotézis és skálatörvények dinamikai megfelelőjének kidolgozása *Ferrel* és *munkatársai* [59], illetve *Halperin* és *Hohenberg* [60] nevéhez fűződik. Ez utóbbiak voltak azok, akik a Wilson-féle impulzus térbeli RCSM-et először alkalmazták kritikus dinamikára, igazolva ezzel a dinamikus skálahipotézis helyességét [61]. Az RCSM sztatikára történő alkalmazásánál megköveteljük, hogy a transzformáció hatására a rendszer szabadenergiája invariáns legyen. Ez rendkívül erős megszorítást jelent a renormalizációs csoport transzformáció analitikus alakjára nézve. A szabadenergiához hasonló mennyiség dinamika esetén nem létezik. A rendparaméter és valószínűségeloszlások mozgásegyenletét fenomenologikus megfontolások alapján szerkesztjük meg (*Langevin*, *Master*, *Fokker—Planck*-egyenletek). A renormalizációs csoport transzformációtól ilyenkor azt követeljük meg, hogy a mozgásegyenlet alakját invariánsan hagyja. Egy további nehézséget a megmaradási törvények jelentenek. Az univerzalitási osztályok a megmaradási törvényeknek megfelelően tovább tagozódnak [34].

Az RCSM alkalmazása dinamikus kritikus jelenségek vizsgálatára, hasonlóan a sztatikához először folytonos spinrendszerekre történt az ε és $1/n$ sorfejtések segítségével [61, 62]. A kritikus dinamika vizsgálata valós térbeli RCSM-rel rendkívül nehéznek bizonyult. Így az első publikáció ezen a téren 1978-ban született [44]. Azóta azonban sok kutatónak sikerült a sztatikából ismert különböző valós térbeli RCSM-eket dinamikára általánosítani [44—46, 63, 64].

Dolgozatunk V. fejezetében tehát a Migdal-féle eljárást általánosítjuk kritikus dinamika tárgyalására. A módszert részletesen a két dimenziós *Glauber*-modellen keresztül mutatjuk be, aholis eredményeink összehasonlíthatók a hőmérsékleti sorfejtések eredményeivel. A módszer részletes ismertetése után, kihasználva annak

egyszerűségét, a q állapotú Potts-modell dinamikáját vizsgáljuk [65]. Végezetül eljárásunkat az inhomogén Ising-modell és spinüveg kritikus dinamikájának egy lehetséges leírására alkalmazzuk [66].

A dolgozat VI. fejezetében összefoglaljuk eredményeinket.

II. A RENORMALIZÁCIÓS CSOPORT SZTATIKUS ESETBEN

Ebben a fejezetben a Wilson-féle renormalizációs csoport főbb vonásait ismeretjük sztatika esetére. Az alábbiak mind impulzus térbeli, mind reális térbeli renormálás esetében érvényesek. A konkrétság érdekében spinrendszereket tárgyalunk.

A Wilson-féle renormalizációs csoport alapvető gondolatát a következőképpen fogalmazhatjuk meg:

a) Az adott (vagy kezdeti) \mathcal{H} Hamilton-operátort (\mathcal{H} -n a továbbiakban a — (Hamilton-operátor)/ kT hányadost fogjuk érteni, ahol k a Boltzmann-állandó, T az abszolút hőmérséklet) transzformáljuk, vagy renormáljuk. Ekkor egy új \mathcal{H}' Hamilton-operátort kapunk. Formálisan:

$$\mathcal{H} \Rightarrow \mathcal{H}' = R[\mathcal{H}] \quad (\text{I.1})$$

b) Az R renormalizációs operátor hatására a szabadsági fokok kezdeti N száma (vagy a spinváltozók száma)

$$N' = N/b^d \quad (\text{I.2})$$

-re csökken, ahol d a térbeli dimenziószám, b pedig egynél nagyobb értékű térbeli skálafaktor.

c) A leglényegesebb feltétel, aminek R eleget kell tennie az, hogy hatására az állapotösszeg invariáns maradjon, azaz

$$Z_{N'}\{\mathcal{H}'\} = Z_N\{\mathcal{H}\}. \quad (\text{I.3})$$

A renormalizációs operátort többféleképpen választhatjuk meg. Egyik lehetőség, hogy előírjuk, hatására ki kell integrálni az impulzus térben felírt Hamilton-operátor kis hullámhosszúságú (nagy impulzusú) részét. Ekkor tehát a szabadsági fokok redukálása az impulzus változók számának csökkentésében jelentkezik, (impulzus térbeli renormálás). Egy másik lehetőség, hogy R -et a Boltzmann-faktornak az eredeti N számú spinváltozó közül kiválasztott $(N-N')$ szerinti spurjaként definiáljuk. Ekkor a renormált Hamilton-operátor az:

$$\exp[\mathcal{H}'] = \text{Tr}_{N-N'}\{\exp[\mathcal{H}]\} \quad (\text{I.4})$$

alakban írható, ahol $\text{Tr}_{N-N'}$ az $N-N'$ számú szabadsági fok szerinti spurt (integrált) jelenti (reális térbeli renormálás). Könnyen látható, hogy (I.4) kielégíti az (I.3) követelményt.

d) Annak érdekében, hogy a szabadsági fokok (azaz a spinek) térbeli sűrűsége ne változzon meg, minden térbeli vektort b segítségével átskálázunk:

$$x \Rightarrow x' = x/b. \quad (\text{I.5})$$

Az impulzusok ilyenkor

$$q \Rightarrow q' = bq \quad (\text{I.6})$$

szerint transzformálódnak.

e) Végezetül, hogy a spinek fluktuációinak nagysága is változatlan maradjon, a spinváltozókat is átskálázzuk:

$$\tilde{s}_x \Rightarrow \tilde{s}'_x = \tilde{s}_x/c. \quad (I.7)$$

Itt c függ a \mathcal{H} Hamilton-operátortól.

Nyilvánvaló, hogy a renormalizációs operátor függ b -től és c -től. Hatására a szabadenergia sűrűsége az

$$f[\mathcal{H}'] = b^d f[\mathcal{H}] \quad (I.8)$$

kifejezésnek megfelelően transzformálódik. (I.7)-ből látszik, hogy a spin-spin korrelációs függvényre fennáll:

$$\langle \tilde{s}_0 \tilde{s}_x \rangle = G(x; \mathcal{H}) = c^2 G(x/b; \mathcal{H}') \quad (I.9)$$

(I.8) és (I.9) vezet el a skálatulajdonságokhoz, vagy homogenitási tulajdonságokhoz.

Miután fentiekben definiáltuk az R renormalizációs operátort, az eljárás a következő:

I. A transzformációt iteráljuk:

$$\mathcal{H}' = R[\mathcal{H}], \mathcal{H}'' = R[\mathcal{H}'], \dots \quad (I.10)$$

II. A kezdeti Hamilton-operátor paramétereinek változtatásával megpróbáljuk meghatározni az úgynevezett fix pont Hamilton-operátort, \mathcal{H}^* -ot, melyet feltevésszerűen az (I.10) iteráció megközelít. A fix pont Hamilton-operátort úgy definiáljuk, hogy az invariáns legyen R -rel szemben, azaz

$$R[\mathcal{H}^*] = \mathcal{H}^*. \quad (I.11)$$

III. Ha ezután megvizsgáljuk az (I.9) transzformációs összefüggést, akkor azt találjuk, hogy a fix pont Hamilton-operátor kritikus abban az értelemben, hogy a neki megfelelő spin-spin korrelációs függvény hosszú hatótávolságú. (I.9)-ből $G(x; \mathcal{H}^*)$ -ra függvényegyenletet kapunk, melynek megoldása

$$G(x; \mathcal{H}^*) \sim 1/x^{2\epsilon}, \quad c^* = c[\mathcal{H}^*] = b^{-\epsilon}. \quad (I.12)$$

Mivel az η kritikus index a

$$G(x, T_c) \sim 1/x^{d-2+\eta} \quad (I.13)$$

összefüggéssel van definiálva [15] (T_c a kritikus hőmérséklet), ezért

$$c^* = b^{-(d-2+\eta)/2}. \quad (I.14)$$

Mindazok a Hamilton-operátorok, melyek az iteráció során \mathcal{H}^* -hoz tartanak, a Hamilton-operátorok terében egy úgynevezett kritikus felületen helyezkednek el.

IV. Hogy a rendszer viselkedését a kritikus pont körül vizsgálhassuk, a renormalizációs operátort linearizáljuk \mathcal{H}^* körül. Ekkor

$$\mathcal{H}' = R[\mathcal{H}] = R[\mathcal{H}^* + hQ] = \mathcal{H}^* + hLQ + O(h^2), \quad (I.15)$$

ahol L lineáris operátor (a Hamilton-operátorok terében). (I.15)-ből, valamint R tulajdonságából könnyen belátható, hogy $L[\mathcal{H}^*]$ csoporttulajdonsággal bír:

$$L_b[\mathcal{H}^*]L_{b'}[\mathcal{H}^*] = L_{bb'}[\mathcal{H}^*]. \quad (I.16)$$

V. Mivel most már renormalizációs operátorunk lineáris, ezért kereshetjük annak Q_j sajátoperátorait és b^{λ_j} sajátértékeit:

$$LQ_j = b^{\lambda_j} Q_j. \quad (I.17)$$

Q_j -k képezik a kritikus változók spektrumát. Egy szokásos megfeleltetés: $Q_1(\sim E)$ -energiasűrűség, $Q_2(\sim M)$ -rendparaméter, vagy mágneszettség.

VI. A közel kritikus Hamilton-operátor \mathcal{H}^* körül Q_j -k szerint kifejtethető:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + \sum_j h_j Q_j. \quad (I.18)$$

Az $f[\mathcal{H}]$ szabadenergia sűrűség a h_j együtthatók függvényének tekinthető, h_j -k a skálaterek [67] (scaling field). Ha Q_j -ket fenti módon feleltetjük meg a kritikus változóknak, akkor h_1 lineáris T -ben, úgy hogy $h_1 \sim t \sim T - T_c$. Hasonlóképpen h_2 ferromágnes esetén arányos a H mágneses térrel. (I.18)-at (I.15)-be behelyettesítve és felhasználva (I.17)-et

$$R[\mathcal{H}] = \mathcal{H}' = \mathcal{H}^* + \sum_j h_j b^{\lambda_j} Q_j + O(h^2). \quad (I.19)$$

Elhagyva a nemlineáris tagot, fentit diagonalizált rekurziós összefüggés formájában írhatjuk fel:

$$h'_j = b^{\lambda_j} h_j. \quad (I.20)$$

Felhasználva (I.17)-et, valamint az (I.8) összefüggést végeztetül

$$f(h_1, h_2, h_3, \dots) = b^{-d} f(b^{\lambda_1} h_1, b^{\lambda_2} h_2, b^{\lambda_3} h_3, \dots) \quad (I.21)$$

adódik.

VII. (I.21) nem más, mint a skálainvarianciát magába foglaló aszimptotikus homogenitást kifejező összefüggés. Hogy ezt láthassuk, válasszuk meg b -t úgy, hogy fennálljon $b^{\lambda_1} t = 1$. Ne feledjük, hogy esetünkben $h_1 = l_1 t$ és $h_2 = l_2 H$, ahol l_1 és l_2 arányossági tényezők. Ekkor

$$f(t, H, h_3) = t^{d/\lambda_1} f(l_1, l_2 H/t^{\lambda_2/\lambda_1}, h_3/t^{\lambda_3/\lambda_1} \dots). \quad (I.22)$$

Másrészt a fenomenologikus homogenitást kifejező összefüggés alapján [15]

$$f(t, H) = t^{2-\alpha} Y(H/t^\Delta) \quad (I.23)$$

ahol Δ az úgynevezett gap exponens, melyre fennáll

$$\Delta = \frac{1}{2} (2 - \alpha + \gamma) \quad (I.24)$$

α és γ a szokásos kritikus indexek [15].

Összehasonlítva (I.23)-at (I.22)-vel

$$2 - \alpha = d/\lambda_1, \quad \Delta = \lambda_2/\lambda_1. \quad (I.25)$$

Végeztetül a fenti eljárásból négy következtetés adódik:

A) Ha létezik fix pont Hamilton-operátor, mely körül a renormalizációs csoport linearizálható, akkor az egyben minden olyan Hamilton-operátorra, mely elegendően közel van \mathcal{H}^* -hoz, azt jelenti, hogy a szabadenergia aszimptotikusan

változóinak homogén függvénye, mely meghatározott skálatranszformációnak tesz eleget.

B) A kritikus indexek a linearizált renormalizációs operátor sajátértékeiből határozhatók meg.

C) A Hamilton-operátorok nagy osztályára fennáll az univerzalitás, ami azt jelenti, hogy egyazon univerzalitási osztályba tartozó Hamilton-operátorok, ugyanarra a fix pontra vezetnek. Ennek alapján lehet csoportosítani a Q_k sajátoperátorokat releváns, irreleváns és marginális változókba [18]. Irrelevánsak az olyan operátorok, melyekre $\lambda_k < 0$. Ezek járuléka nem befolyásolhatja a kritikus indexek értékét, hiszen ezekre

$$h_k^{(n)} = (b^{\lambda_k})^n h_j \rightarrow 0. \quad (I.26)$$

D) Végetekül a fix pont fogalma lehetőséget nyújt az úgynevezett crossover jelenségek [68] leírására. $Q_1 \sim E$ -n és $Q_2 \sim M$ -n kívül egyéb olyan Q_j operátorokat is figyelembe vehetünk, melyekre $\lambda_j > 0$, azaz melyek relevánsak. Mint ahogy (I.26)-ból látható egy releváns operátor ($\lambda_j > 0$) az iterálás hatására növekszik, következésképpen a rendszer instabillá válhat és így \mathcal{H} a \mathcal{H}^* fix pontból egy másik fix pontba juthat. Ehhez az új fix ponthoz új sajátértékek és így új kritikus indexek tartoznak, melyek általában különböznek az előbbiektől. (A Q_1 és Q_2 -vel kapcsolatos instabilitást úgy szüntetjük meg, hogy T -t és H -t a megfelelő kritikus értékekhez illesztjük.)

A következő fejezetben a fenti gondolatokat konkrét példával a Migdal-féle rekurziós eljárással fogjuk illusztrálni.

III. A MIGDAL-FÉLE RENORMALIZÁCIÓS CSOPORT

A konkrétság érdekében tekintsünk egy két dimenziós spin rendszert és vezessük be a $Z_L\{s_H\}$ funkcionált. Z_L az L lineáris méretű rendszer particiók függvénye rögzített határspinekkel. Más szóval

$$Z_L\{s_H\} = \sum_{\{s_B\}} e^{\mathcal{H}(s_B, s_H)} \quad (II.1)$$

Z_L tehát a határspineloszlás funkcionálja. Folytonos spinrendszerek esetén a szumma jel integrállal helyettesítendő. A Z funkcionál multiplikatív tulajdonságú [69]. Két dimenzióban például 4 szomszédos L lineáris méretű tartomány egymáshoz csatlakoztatásakor (amennyiben (I.1)-ben a határspinek közötti kölcsönhatást $1/2$ súllyal vesszük figyelembe), a megfelelő Z_L funkcionálokat össze kell szorozni és a közös határon levő spinekre ki kell integrálni. Vagyis

$$Z_{2L}\{s_H\} = \sum_{\{s_{KH}\}} \prod_{i=1}^4 Z_L\{s_H, \gamma_i\} \equiv R(Z_L). \quad (II.2)$$

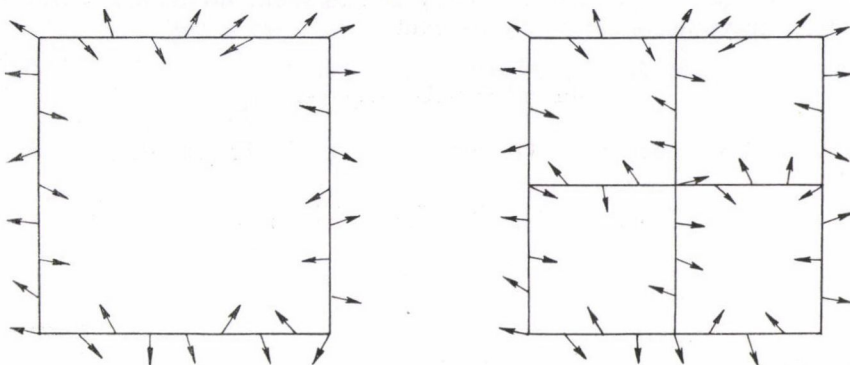
Itt s_{KH} a közös határon levő spineket, γ_i pedig az egyes tartományok határát jelenti. A (II.2) formula rajzban az 1. ábrán látható.

(II.3) funkcionális rekurziós összefüggés, melyet a

$$Z_a \exp = \left(\frac{\beta}{2} \sum_{i=1}^4 s_i s_{i+1} + \frac{h}{2} \sum s_i \right) \quad (II.3)$$

kezdeti feltétellel kell megoldani. Itt Z_a az elemi cella partició funkcionálja és a vizsgált spinrendszerről feltételeztük, hogy Hamilton-operátora csak legközelebbi szomszédok közötti kölcsönhatást tartalmaz (β). h a dimenziótlan mágneses tér.

(II.2) renormalizációs csoport transzformációnak tekinthető, méghozzá $b=2$ skálafaktorral. Nyilván hasonló egyenlet írható fel tetszőleges b -re és d dimenzióra. Ilyenkor (II.2)-ben b^d tényező szerepel.



1. ábra. Egzakt renormalizációs csoport transzformáció $d=2, b=2$ esetén

Minket az $L \rightarrow \infty$ rendszer szabadenergiája érdekel. Ez általános esetben a következőképpen kapható meg. Legyen

$$Z_L\{s_H\} = \langle Z_L \rangle W_L\{s_H\}. \quad (\text{II.4})$$

Itt $\langle Z_L \rangle$ a partició funkcionál $Z_L\{s_H\}$ s_H -kra vett integrálja, $\langle Z_L \rangle$ tehát a szokásos partició függvény. Ekkor W_L -re fennáll, (II.2) és (II.4) alapján

$$W_{2L} = R(W_L) / \langle R(W_L) \rangle. \quad (\text{II.5})$$

Tetszőleges d dimenziószám esetén ($b=2$) nyilván

$$\langle Z_{2L} \rangle = \langle Z_L \rangle^{2^d} \langle R(W_L) \rangle. \quad (\text{II.6})$$

Végül a végtelen kiterjedésű rendszer szabadenergiája

$$-\frac{F(\beta, h)}{kT} = \lim_{L \rightarrow \infty} L^{-d} \langle Z_L \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} 2^{-kd} \ln \langle R(W_{2^{k-1}}) \rangle + \ln \langle Z_a \rangle \quad (\text{II.7})$$

ahol az $L=2^k$ jelölést használtuk és a rendszer rácsállandóját egységnyiinek választottuk.

Mind ez ideig az eljárás teljesen általános volt. Sajnos a (II.2), vagy (II.5) funkcionális egyenletek egzaktul nem oldhatók meg, ezért a továbbiakban ismertetjük azok közelítő Migdal-féle megoldását [49].

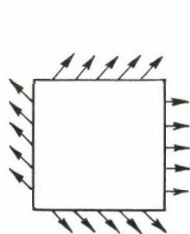
Tekintsünk ferromágneses spinrendszereket. Ekkor alacsony hőmérsékleten eltekintünk az L élhosszúságú négyzet egyes élein levő spinek fluktuációjától

(lásd 2. ábra). $T=0$ hőmérsékleten a spinek valóban mind párhuzamosak, tehát azt várjuk, hogy közel $T=0$ -hoz közelítésünk nem túl rossz. Ez egyben azt is jelenti, hogy csak olyan rendszerek kritikus viselkedését tudjuk kielégítő pontossággal tárgyalni, melyeknek kritikus hőmérséklete közel van 0-hoz, vagyis a rendszert olyan dimenzióban vizsgáljuk, mely közel van az alsó kritikus dimenziószámhoz (lásd Bevezetés). Ha tehát az egyes éleken eltekintünk a spinirányok fluktuációjától, akkor minden élen bevezethetünk egy-egy átlagos spint. Így (lásd 2. ábra) a Z_L funkcionált négyváltozós függvénnyel közelítjük

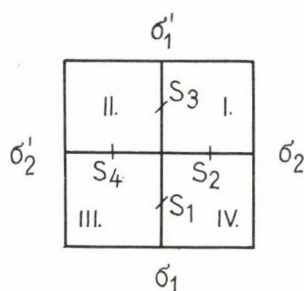
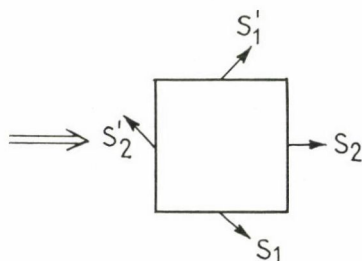
$$Z_L\{s_H\} = Z_L(s_1, s'_1; s_2, s'_2). \quad (\text{II.8})$$

A Migdal által bevezetett másik közelítés a faktorizáció. Ez azt jelenti, hogy

$$Z_L(s_1, s'_1; s_2, s'_2) = F_L(s_1, s'_1) F_L(s_2, s'_2). \quad (\text{II.9})$$



2. ábra. Alacsony-hőmérsékleti közelítés az eredeti Migdal-módszerben



3. ábra. Renormalizációs csoport transzformáció Migdal-közelítése $d=2$, $b=2$ esetén

A (II.2) rekurziós egyenlet sematikusan most a 3. ábrával illusztrálható. Ha elvégezzük a négy belső spinre az integrálást F_L -re a következő rekurziós formulát kapjuk:

$$F_{2L}(s, s') = (F_L^2)_{ss'}^2 \quad (\text{II.10})$$

ahol

$$(F^2)_{ss'} = \sum_{s''} F(ss'') F(s''s). \quad (\text{II.11})$$

Tetszőleges skálafaktor és dimenziószám esetén (II.10) helyett

$$F_{bL}(ss') = (F_L^b)_{ss'}^{b^d-1} \quad (\text{II.12})$$

áll fenn.

A továbbiakban a (II.12) egyenlet megoldását ismertetjük Ising és n -vektor modell esetén.

III/a. Ising-modell

Ising-modell esetén a csupán 2 spintől függő, normált F_L függvényt a legáltalánosabban az

$$F_L(ss') = \frac{1}{4} (1 + ss' \tanh(K_L)) = \frac{e^{K_L ss'}}{4 \cosh(K_L)} \quad (\text{II.13})$$

alakban írhatjuk. (A mágneses tértől egyelőre eltekintünk.) Itt K_L az L lineáris mérethez tartozó legközelebbi szomszédok közötti (dimenziótlan) csatolási állandó. (II. 13) segítségével a (II.12) egyenlet egzaktul megoldható és K_{bL} -re a

$$\tanh\left(\frac{K_{bL}}{b^{d-1}}\right) = \tanh^b(K_L) \quad (K_a = K) \quad (\text{II.14})$$

rekurziós egyenlet adódik. $d=2$ és a $b \rightarrow 1$ határesetben (II.14) fix pont megoldása

$$K^* = -\frac{1}{2} \ln [\tanh(K^*)] = -\frac{1}{2} \ln (2^{1/2} - 1). \quad (\text{II.15})$$

Ez éppen a két dimenziós Ising-modell Onsager megoldása [6]. Természetesen a fix pont csatolási állandó tetszőleges b esetére kiszámítható. A II. fejezetben elmondottak alapján a kritikus indexeket a linearizált renormalizációs operátor sajátértékei adják. (II.14)-et K^* körül linearizálva, figyelembe véve, hogy $K \sim \frac{1}{T}$, végül is

$$\Delta' = d - \frac{1}{\nu} = \frac{1}{\ln b} \ln \frac{\sinh(2K^*)}{\sinh\left(\frac{2K^*}{b^{d-1}}\right)}. \quad (\text{II.16})$$

Itt ν a szokásos kritikus index [15]. $d=2$ és $b \rightarrow 1$ esetén

$$\Delta' = 1,246. \quad (\text{II.17})$$

Ez különbözik a $\Delta' = 1$ egzakt értéktől [6].

Nem zérus mágneses tér esetén F_L -t

$$F_L(ss') = \frac{1}{4 \cosh(K^*)} \exp [K^* ss' + h_L(s + s')] \quad (\text{II.17'})$$

alakban vesszük fel, és (II.12)-t h_L -ben linearizálva oldjuk meg. A skálahipotézis alapján [15]

$$h_{bL} = b^{d-\beta/\nu} h_L \quad (\text{II.18})$$

(II. 12)-ből

$$\Delta = \frac{\beta}{\nu} = 1 + \frac{2K^*}{\ln b} (b^{1-d} - 1) \quad (\text{II.19})$$

$d=2$, $b \rightarrow 1$ esetén

$$\Delta = 0,119. \quad (\text{II.20})$$

Az egzakt eredmény $\Delta = 0,125$ [70].

Mint látjuk tehát a két dimenziós Ising-modell esetén a Migdal-eljárás a kritikus hőmérsékletre egzakt eredményt ad, ugyanakkor a kritikus indexek értéke különbözik az egzakt értékektől. A kritikus hőmérséklet értékére azért kapunk egzakt eredményt, mert a Migdal-féle rekurziós egyenletek őrzik a két dimenziós Ising-modell duális invariancia tulajdonságát. Ez abban jelentkezik, hogy (II.14), amikor K^* -ra van felírva invariáns a $b \rightarrow b^{-1}$, $K^* \rightarrow b^{d-1} K^*$ transzformációval szemben. Ugyanakkor $d=2$ nem az Ising-modell alsó kritikus dimenziószáma (az $d=1$), ezért nem meglepő, hogy a kritikus indexek értéke különbözik az Onsager által kapott eredménytől.

III/b. n -vektor modell

n -vektor modellnél lévén folytonos spinrendszer [16] az alsó kritikus dimenziószám [28] 2, ezért $d=2+\varepsilon$ esetén azt várjuk, hogy a Migdal-közelítés igen pontos eredményt ad.

A két spintől függő F_L függvény most csak a két folytonos spin vektor skaláris szorzatától függ [15], így alacsony hőmérsékleten F_L -t az

$$F_L(\vec{s}\vec{s}') = F_L(\cos \Theta) \cong \exp \left(A(L) - \beta(L) \frac{\Theta^2}{2} \right) \quad (\text{II.21})$$

alakban vehetjük fel. Itt \vec{s} , n komponensű egységvektor. Az effektív hőmérsékletet $\beta^{-1}(L)$ adja meg. (II.21)-et (II.12)-be beírva és az integrálást a nyeregpon módszerrel elvégezve $\beta(L)$ -re a

$$\beta(bL) = b^\varepsilon \beta(L) + \frac{1}{6} (n-2) b^\varepsilon (1-b) + O(\beta^{-1}) \quad (\text{II.22})$$

rekurziós egyenlet adódik.

Fenti fix pont megoldása

$$\beta^* = \frac{n-2}{6} \frac{1-b}{b^{-\varepsilon}-1} \xrightarrow{\varepsilon \ll 1} \frac{n-2}{6\varepsilon} \frac{b-1}{\ln b} \quad (\text{II.23})$$

(II.22)-t β^* közül linearizálva, a v kritikus indexre

$$v = \varepsilon^{-1} \quad (\text{II.24})$$

adódik.

A mágneses kritikus index Δ is számítható [49]. Értéke

$$\Delta = \frac{n-1}{n-2} \frac{\varepsilon}{2} + O(\varepsilon^2). \quad (\text{II.25})$$

A kritikus indexek ε sorfejtésének lineáris tagjai egzaktul is számíthatók térelméleti módszerekkel [26, 27]. Az így kapott értékek egybeesnek (II.24)-gyel és (II.25)-tel.

$b \rightarrow 1$ esetén a β^* -ra kapott eredmény mindössze 5%-kal tér el a $\beta^* = \frac{n-2}{2\pi\varepsilon}$ egzakt eredménytől.

Látjuk tehát, hogy az alsó kritikus dimenziójához közel vizsgált n -vektor modellre a Migdal-közelítés valóban kitűnő eredményt ad.

IV. A MIGDAL-FÉLE MÓDSZER ÁLTALÁNOSÍTÁSA FOLYTONOS SZIMMETRIÁJÚ SPINRENDSZEREK ESETÉN

Az előző fejezetben ismertettük a (II.2) és (II.5) rekurziós egyenletek eredeti, Migdal által kidolgozott közelítő megoldását. A (II.12) rekurziós összefüggést, mely az eljárás alapegyenlete, *Kadanoff* az úgynevezett „potenciáltolás” segítségével kapta meg [54]. Ő volt az, aki kritikusan analizálta is Migdal módszerét és annak következő hiányosságaira mutatott rá.

1. A Migdal-féle F függvényben a négyzet különböző éleihez tartozó spinek nincsenek korrelációban (lásd a (II.9) egyenletet).
2. A kapott eredmények nem mindig túl jók, ami azzal van összefüggésben, hogy a Migdal-közelítés szigorúan véve csak az adott rendszer alsó kritikus dimenziószáma környékén érvényes.
3. Mivel az eljárás a decimáción alapul [71], vagyis a spinváltozókat a transzformáció során nem skálázzuk ((I.7)-ben $c=1$), ezért csak olyan rendszerekre várhatunk helyes eredményeket, melyekre a β és ν kritikus indexek aránya (β/ν) zérus, vagy legalábbis kicsi. (Ez az (I.9) és (I.13) összefüggésekből látszik. Ha $c=1$, akkor (I.9) a kritikus pontban azt jelenti, hogy $x^{d-2+\eta} = \left(\frac{x}{b}\right)^{d-2+\eta}$. Ez az összefüggés csak $d-2+\eta=0$ esetén állhat fenn, ha $b \neq 1$. A skálatörvények alapján [15] viszont $d-2+\eta=2\left(\frac{\beta}{\nu}\right)$.

Kadanoff elegáns potenciáltolási eljárása lehetővé tette a módszer széles körű alkalmazását. A potenciáltolás segítségével számos rendszer összetett fázisdiagramját sikerült kvalitatíve igen jól meghatározni [51, 72–82]. Annak érdekében, hogy a Kadanoff-módszer segítségével kapott eredmények numerikus pontosságát növelni lehessen *Martinelli* és *Parisi* a potenciáltolást általánosította [55], mégpedig úgy, hogy a spineket összekötő csatolásoknak csak $(1-\varepsilon)$ -d részét tölték el. ($\varepsilon=0$ itt az eredeti rendszernek felel meg.) Így szisztematikus ε sorfejtést produkáltak.

A fent említett három nehézségen túl még további kettőt említhetünk.

4. Migdal feltételezte, hogy a négyzet egy-egy élén elhelyezkedő spinek iránya azonos (alacsony hőmérsékleti közelítés). Ez azt jelenti, hogy a spinirány a négyzet csúcsainál élesen változik.
5. A Migdal-közelítés nem tekinthető szisztematikus közelítő eljárás első lépésének [53].

Jelen fejezetben a Migdal-módszer olyan általánosítását ismertetjük folytonos szimmetriájú spinrendszerek esetén, melynek segítségével a fentiekben említett nehézségek, a 2. és 3.-ban említett kivétellel elvben kiküszöbölhetők. Az általánosítást az egyszerűség kedvéért először a két dimenziós harmonikus rotátoron keresztül mutatjuk be.

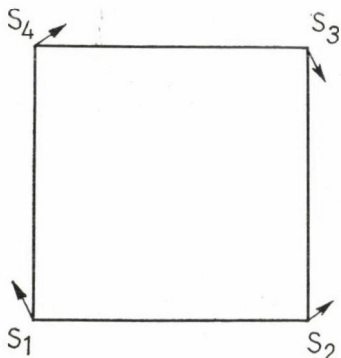
IV/a. A harmonikus rotátor $d=2$ esetén

A két dimenziós harmonikus rotátor modellt a következő Hamilton-függvény definiálja [75, 83]

$$\mathcal{H} = -K \sum_{\langle ij \rangle} (\Theta_i - \Theta_j)^2 - h \sum_i (1 - \alpha \Theta_i^2), \quad -\infty \leq \Theta_i \leq \infty. \quad (\text{IV.1})$$

Itt Θ_i az i -edik rácspontban levő egységnyi hosszúságú két dimenziós spinvektor polár szöge ($s_x^i = \cos \Theta_i$, $s_y^i = \sin \Theta_i$). $K > 0$, ferromágneses csatolási állandó, h a külső mágneses tér, α pedig tetszőleges, egységnyi nagyságrendű állandó.

(Értékét általában $\frac{1}{2}$ -nek választják, amikor is $(1 - \alpha\Theta_i^2)$ a $\cos \Theta_i$ kifejezés Taylor sorának első tagjait adja.) A harmonikus rotátor modellről két dimenzióban tudott [75], hogy bármely hőmérsékleten kritikus viselkedést mutat, vagyis az $\langle e^{i(\Theta_i - \Theta_j)} \rangle$



4. ábra. Határspinek az általánosított Migdal-módszerben. Elsőrendű közelítés

korrelációs függvény tetszőleges hőmérsékleten (I.13) alakú. A renormalizációs csoport módszer nyelvén ez azt jelenti, hogy a hőmérséklet változóra felírt rekurziós egyenletnek végtelen sok fix pontja (nevezetesen az egész hőmérsékleti tengely), azaz fix vonala van. Az olyan renormalizációs csoport egyenlet, mely nem rendelkezik ezzel a tulajdonsággal, eleve nem adhat megbízható eredményt.

A Migdal-módszer általánosításakor az egzakt (II.2) egyenletről indulunk ki. Mint említettük, ez funkcionális rekurziós egyenlet. Analitikusan csak akkor remélhetjük megoldani, ha a funkcionálokat függvényekkel közelítjük. A Z_L funkcionált a közelítés legalacsonyabb rendjében mi is négyváltozós függvénnyel helyettesítjük. A négy spint azonban a korábban említett 4. nehézség kiküszöbölése érdekében a négyzet csúcsain képzeljük el a 4. ábrának megfelelően. Zérus külső mágneses tér

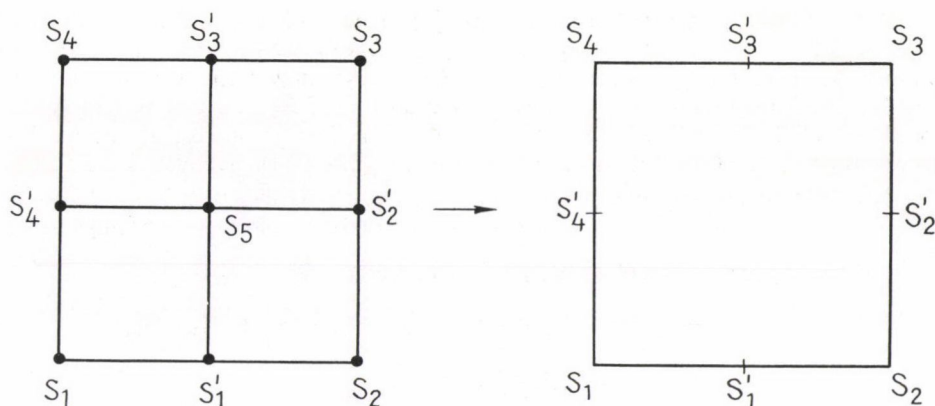
esetén a (IV.1) Hamilton függvénynek megfelelő legáltalánosabb, (II.4) segítségével definiált, normált, közelítésünk első rendjének megfelelő W_L^1 függvényt a következő alakban vehetjük fel:

$$W_L^1 = C_L^1 \exp \{ -\beta_L (\Theta_{13}^2 + \Theta_{24}^2) - \gamma_L (\Theta_{12}^2 + \Theta_{23}^2 + \Theta_{34}^2 + \Theta_{41}^2) \}. \quad (\text{IV.2})$$

Itt $\Theta_{ij} = \Theta_i - \Theta_j$, β_L és γ_L az L élhosszúságú négyzetre definiált csatolási állandók (osztva kT -vel, vagyis egyben fordítottan arányosak a hőmérséklettel). Könnyen látható, hogy (IV.2) a legáltalánosabb kvadratikussá alak, melyet a 4. ábrán látható négyzetre definiálhatunk. C_L állandó, mely biztosítja W_L normáltságát. (IV.2) azt jelenti, hogy elvetettük a Migdal által használt faktorizációt (II.9). Ennek ára, hogy egy helyett két csatolási állandóval kell dolgoznunk. A (II.5) egyenlet általunk használt közelítése a (IV.2)-vel megadott W_L függvény esetén az 5. ábrával illusztrálható.

Az egyetlen integrálandó spinváltozó (II.2)-ben tehát s_5 . Az ábráról látható azonban, hogy a rekurzió végén a független spinváltozók száma (eredetileg négy volt, lásd 5. ábra) megnőtt. Ez azt jelenti, hogy a skálatranszformáció előtti és utáni négyzeteket nem tudjuk összehasonlítani, vagyis nem tudunk rekurziós egyenleteket felírni. A felesleges s'_1, \dots, s'_4 spinváltozóktól tehát meg kell szabadulnunk. Ferromágneses rendszerről lévén szó, mi is feltételezhetjük, hogy az alacsony hőmérsékleti tartományban a spinirányok nem nagyon különböznek egymástól, ezért s'_1 polár szögét a

$$\Theta_{1'} = \frac{\Theta_1 + \Theta_2}{2} \quad (\text{IV.3})$$



5. ábra. Renormalizációs csoport transzformáció az általánosított Migdal-módszerben elsőrendű közelítés esetén. $d=2$, $b=2$

összefüggéssel rögzítjük. Hasonlóan járunk el $\Theta_{2'}$, $\Theta_{3'}$ és $\Theta_{4'}$ esetében is. Így az s'_i spinek többé nem függetlenek, vagyis most már a rekurziós egyenletben hasonló négyzeteket tudunk összevetni. Az s_5 szerinti integrálás egzaktul elvégezhető. (IV.3) felhasználásával a csatolási állandókra a következő rekurziós összefüggéseket kapjuk:

$$\beta_{2L} = \frac{3}{4} \beta_L + \frac{1}{2} \gamma_2, \quad (IV.4)$$

$$\gamma_{2L} = \frac{1}{4} \beta_L + \frac{1}{2} \gamma_2 \quad (IV.5)$$

(IV.4) és (IV.5) fix pont megoldása $\beta^* = \beta_L = \beta_{2L}$, $\gamma^* = \gamma_L = \gamma_{2L}$ és így

$$\beta^* = 2\gamma^*. \quad (IV.6)$$

Továbbá könnyen látható, hogy a $\beta_L + \gamma_L$ kombináció invariáns a skálatranszformációval szemben.

$$\beta_L + \gamma_L = \beta_{2L} + \gamma_{2L} = \text{állandó}. \quad (IV.7)$$

Eme kombináció értékét a paraméterek kezdeti értéke határozza meg. Ha a hőmérséklet skáláját $\beta_L = \frac{\beta'_L}{T_L}$, $\gamma_L = \frac{\gamma'_L}{T_L}$ segítségével, a $\beta'_L + \gamma'_L = \frac{1}{4}$ összefüggéssel rögzítjük, akkor fentiekből

$$T_L = T_{2L} = T \quad (IV.8)$$

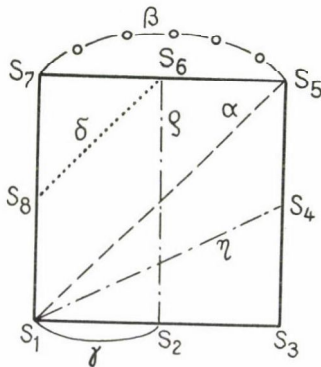
következik. Vagyis a hőmérséklet tetszőleges értéke rekurziós egyenleteink fix pont megoldását adja. Ez összhangban van a harmonikus rotátor modelltől korábban ismertetett egzakt információval. Megemlítjük még, hogy a $\beta'_L + \gamma'_L = \frac{1}{4}$ választás (IV.2) és a folytonos modell [26, 27] ($\Theta = \Theta(x, y)$) hatásfüggvényének összehasonlításából adódik.

Hogy közelítő eljárásunkat javítani tudjuk, emlékeztetünk arra, hogy a (II.1) alapegyenletben Z_L olyan mennyiség, mely az L élhosszúságú négyzet élein levő valamennyi spintől függ. Az előzőekben Z_L -t négyváltozós függvénnyel helyettesítettük. Nyilvánvalóan jobb eredményt kapunk, ha Z_L független változóinak számát növeljük. Következő, azaz másodrendű közelítésünk abban áll, hogy Z_L -t, illetve W_L -t a 6. ábrán látható nyolc független változó függvényének választjuk.

A legáltalánosabb kvadratikus alak, melynek segítségével W_L^2 felírható, hat független csatolási állandót tartalmaz (lásd 6. ábra) és a következőképpen írható

$$\begin{aligned} W_L^2 = C_L^2 \exp \{ & -\alpha_L(\Theta_{15}^2 + \Theta_{37}^2) - \beta_L(\Theta_{13}^2 + \Theta_{35}^2 + \Theta_{57}^2 + \Theta_{71}^2) - \\ & -\gamma_L(\Theta_{12}^2 + \Theta_{23}^2 + \Theta_{34}^2 + \Theta_{45}^2 + \Theta_{56}^2 + \Theta_{67}^2 + \Theta_{78}^2 + \Theta_{81}^2) - \\ & -\delta_L(\Theta_{24}^2 + \Theta_{46}^2 + \Theta_{68}^2 + \Theta_{28}^2) - \\ & -\varrho_L(\Theta_{26}^2 + \Theta_{48}^2) - \\ & -\eta_L(\Theta_{14}^2 + \Theta_{47}^2 + \Theta_{25}^2 + \Theta_{27}^2 + \Theta_{63}^2 + \Theta_{61}^2 + \Theta_{83}^2 + \Theta_{85}^2) \}. \end{aligned} \quad (IV.9)$$

(IV.9)-et (II.5)-be írva akkor kapunk rekurziós egyenleteket, ha az ismét fellépő „felesleges” spinek értékét a (IV.3) szabálynak megfelelően rögzítjük. A közös éleken levő spinek szerinti integrálás, noha hosszadalmas, ismét egzaktul elvégezhető. A számolás részletei és a rekurziós egyenletek analitikus alakja az 53. hivatkozásban megtalálható. A rekurziós egyenletek fix pont megoldása csak numerikusan kapható meg. A fix pont csatolási állandók arányára a következő értékeket kapjuk:



6. ábra. Határspinek és csatolási állandók a másodrendű közelítésben

$$\begin{aligned} \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^* &= 2,052 \\ \left(\frac{\gamma}{\alpha}\right)^* &= 6,452 \\ \left(\frac{\delta}{\alpha}\right)^* &= 11,38 \\ \left(\frac{\varrho}{\alpha}\right)^* &= 9,360 \\ \left(\frac{\eta}{\alpha}\right)^* &= 2,185. \end{aligned} \quad (IV.10)$$

A csatolási állandóknak ismét található olyan kombinációja, mely invariáns a re-normalizációs csoport transzformációval szemben. Az adódik, hogy

$$2\alpha_L + 2\beta_L + \gamma_L + \delta_L + \varrho_L + 5\eta_L = \text{állandó}. \quad (IV.11)$$

A fenti kifejezés értékét tehát a csatolási állandók kezdeti értéke határozza meg. A hőmérsékletet ismét az $\alpha_L = \frac{\alpha'_L}{T_L}$, $\beta_L = \frac{\beta'_L}{T_L}$ stb. kifejezések segítségével vezetjük be.

A hőmérsékleti skálát ezúttal úgy választjuk, hogy $2\alpha' + 2\beta' + \gamma' + \delta' + \varrho' + 5\eta' = \frac{1}{2}$.

Ez a választás ismét a folytonos modell hatásfüggvényének és a (IV.9) kifejezésnek az összehasonlításából adódik. Eredményeinket a későbbiekben a folytonos modellre kapott egzakt értékekkel kívánjuk összehasonlítani, és ezért a hőmérsékleti skálát a folytonos modellnek megfelelően kell felvenni.

A közelítés harmadik rendjében nyilván az L hosszúságú négyzet egyes élein 5 független spint hagyunk meg és így W_L^3 -t 16 változós függvényként írjuk fel. Könnyen belátható, hogy $n-d$ rendben $W_L^n 2^{(n+1)}$ független változó függvénye. Minél magasabb rendben számolunk, annál pontosabban közelítjük a Z_L , illetve W_L funkcionált. (A W_L funkcionál esetében az L élhosszon $(L+1)$ független spin van.)

Belátható [53], hogy konstruálható olyan modell spinrendszer, melyre az n -edik közelítésnek megfelelő rekurziós egyenletek egzaktak. (A modell spinrendszer minden n -re másképpen konstruálendő meg.) Ugyancsak bebizonyítható [53], hogy a kapott rekurziós egyenletek a Laplace-féle parciális differenciálegyenletnek négyzetre vett, különböző peremfeltételekhez tartozó, megoldásaival ekvivalensek. Ilyenkor az L élhosszúságú négyzeten folytonos, $\Theta(x, y)$ -nal megadott spinrendszert definiálunk. A rendszer szabadenergiáját

$$F[\Theta] \cong \int_0^L \int_0^L dx dy (\nabla \Theta)^2 \quad (\text{IV.12})$$

alakban vesszük fel. Az egyensúlyi állapotnak megfelelő szabadenergia (IV.12)-nek Θ szerinti minimalizálásából adódik. Így az egyensúlyi állapotban a $\Theta(x, y)$ függvény ki kell elégítse a

$$\Delta \Theta^* = 0. \quad (\text{IV.13})$$

Laplace-egyenletet. A megoldás adott peremfeltételek mellett egyértelmű. A peremfeltételeket az előzőekben ismertetett közelítésnek megfelelően választjuk. Ha L -et az egyszerűség kedvéért 1-nek vesszük, akkor az elsőrendű közelítés által meghatározott peremfeltétel esetén (IV.13) megoldása

$$\Theta(x, y) = \Theta_1 + (\Theta_2 - \Theta_1)x(1-y) + (\Theta_3 - \Theta_1)xy + (\Theta_4 - \Theta_1)y(1-x) \quad (\text{IV.14})$$

(IV.14) azt jelenti, hogy a négyzet peremén levő spineloszlást 4 független mennyiség (az 5. ábrán s_1, s_2, s_3, s_4 polárszöge) határozza meg úgy, hogy a peremen bárhol felvett szögérték (és így az 5. ábrán s'_1, s'_2, s'_3 és s'_4 polárszöge) a perem két végéhez tartozó szögértékből lineáris interpolációval kapható meg. Ha a szabadenergiát a kapott megoldással (IV.12) alapján kiszámítjuk, (IV.2)-höz hasonló kifejezést kapunk, mely tehát két paraméterrel jellemezhető. A két paraméter arányára a (IV.6) eredmény adódik.

A renormalizációs transzformáció fix pontja és a Laplace-egyenlet megoldása közötti, fenti analógia közelítésünk magasabb rendjében is fennáll. (A második közelítésnek megfelelő Laplace-egyenlet teljes megoldása az 53. hivatkozásban megtalálható.)

Mind ez ideig a külső mágneses tér értékét zérusnak választottuk. Az alábbiakban megvizsgáljuk milyen információt kaphatunk elsőrendű közelítésünk segítségével.

vel a mágneses kritikus exponensre, melyet a

$$h_{2L} = 2^{2-\Delta} h_L \quad (\text{IV.15})$$

összefüggés definiál. A mágneses tagot a W_L^1 függvényben (IV.1) alapján, $\alpha = \frac{1}{2}$ választással

$$h_L \left(4 - \frac{1}{2} (\Theta_1^2 + \Theta_2^2 + \Theta_3^2 + \Theta_4^2) \right) \quad (\text{IV.16})$$

alakban vesszük fel. Az első közelítésnek megfelelő rekurziós egyenletek fix pont megoldása $\beta^* = 2\gamma^*$, $h^* = 0$. A rekurziós egyenleteket linearizáljuk a fix pont megoldás körül. A linearizálás eredményeképpen a Δ kritikus index könnyen számolható [53] és

$$\Delta = \frac{T}{48 \ln 2} \quad (\text{VI.17})$$

adódik.

IV/b. Az n vektor modell $d=2$ és $d=2+\varepsilon$ dimenzió esetén

Az előző fejezetben a Migdal-módszer általánosítását egy eléggé mesterséges modell, a harmonikus rotátor példáján mutattuk be. Kvantitatíve eljárásunkról semmit nem tudunk mondani. Kíváncsok olyan modell, illetve olyan mennyiség kiszámítása, melyet esetleg akár egzaktul, akár nagy pontossággal sikerült más módon meghatározni.

Jelen fejezetben az általánosított ferromágneses Heisenberg-modellt, vagy más néven n vektor modellt vizsgáljuk. A modell a

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (\text{IV.18})$$

Hamilton-függvénnyel van definiálva. \vec{s}_i n dimenziós egységvektor és $J > 0$. A (IV.18)-cal megadott rendszer kritikus tulajdonságait az előzőekben ismertetett általánosított Migdal-eljárás segítségével tanulmányozzuk. A Mermin—Wagner-[28] tétel értelmében az általánosított Heisenberg-modellben két dimenzióban véges hőmérsékleten nem következhet be ferromágneses átalakulás. Kettő a rendszer alsó kritikus dimenziója. Az előzőek alapján azt várjuk tehát, hogy $2+\varepsilon$ dimenzióban, ahol ε nagyon kicsi, a Migdal-eljárás pontos eredményeket ad. Ez valóban így is van és a rendszer kritikus hőmérsékletére Migdal [49] ε -ban elsőrendig számolva az egzakt értéktől mindössze 5%-os eltérést kapott (lásd III/b fejezet). Mint látni fogjuk az általunk használt módszer segítségével még ennél is pontosabb eredmény kapható. Először azonban tekintsük a két dimenziós esetet.

Ismét abból indulunk ki, hogy alacsony hőmérsékleten a ferromágneses rendszerben levő spinek közel párhuzamosak, vagyis ugyanabba az irányba mutatnak. Legyen ez az irány az xy síkban. Írjuk az n dimenziós spin vektorokat a következő módon:

$$\vec{s}_i = (|\vec{s}_i''| \cos \varphi_i, |\vec{s}_i''| \sin \varphi_i, |\vec{s}_i^\perp|) \quad (\text{IV.19})$$

ahol alacsony hőmérsékleten $|\tilde{s}_i^\perp| \ll 1$ és $\varphi_i \ll 1$. Továbbá

$$|\tilde{s}_i''|^2 + |\tilde{s}_i^\perp|^2 = 1. \quad (\text{IV.20})$$

Tehát \tilde{s}_i'' az \tilde{s}_i vektor xy síkra vett vetülete és maga is két dimenziós vektor, míg \tilde{s}_i^\perp $(n-2)$ dimenziós vektor, mely merőleges az xy síkra. Mivel a Hamilton-függvény (IV.18) alapján $\cos \Theta_{ij}$ -től függ, ahol $\Theta_{ij} = \Theta_i - \Theta_j$ az \tilde{s}_i és \tilde{s}_j vektorok közötti szög, ezért alacsony hőmérsékleteknél

$$\Theta_{ij}^2 = \varphi_{ij}^2 + |\tilde{s}_i^\perp|^2 + |\tilde{s}_j^\perp|^2 - 2(\tilde{s}_i^\perp, \tilde{s}_j^\perp) - \frac{1}{3} \varphi_{ij}^2 (|\tilde{s}_i^\perp|^2 + |\tilde{s}_j^\perp|^2) - \frac{1}{3} \varphi_{ij}^2 (\tilde{s}_i^\perp, \tilde{s}_j^\perp) \quad (\text{IV.21})$$

Itt $\varphi_{ij} = \varphi_i - \varphi_j$ és φ_i a két dimenziós \tilde{s}_i'' vektor azimutális szöge az xy síkban. (IV.21)-ben az \tilde{s}_i^\perp -ben és φ_{ij} -ben magasabbrendű tagokat elhagytuk, mivel $|\tilde{s}_i^\perp| \sim \sim \varphi_{ij}^2 \sim T$ (T a hőmérséklet) és T kicsi.

Eljárásunk legalacsonyabb rendjében a (IV.2) kifejezésből indulhatunk ki, amelyben azonban most Θ_{ij} -t a bonyolult (IV.21) kifejezés adja meg. A (II.5) rekurziós egyenletben ezúttal az 5. ábrán látható \tilde{s}_5 belső spinnek mind φ , mind \tilde{s}_5 komponense szerint integrálni kell. A számolás részleteitől itt eltekintünk (azok az 56. hivatkozásban megtalálhatók). A legalacsonyabb közelítésben végezetül a következő rekurziós egyenleteket kapjuk

$$\beta_{2L} = \frac{3}{4} \beta_L + \frac{1}{2} \gamma_L - \frac{n-2}{96} \quad (\text{IV.22})$$

$$\gamma_{2L} = \frac{1}{4} \beta_L + \frac{1}{2} \gamma_L - \frac{n-2}{96(\beta_L + 2\gamma_L)} \cdot \beta_L. \quad (\text{IV.23})$$

Itt az $(n-2)$ -vel arányos tagok $\frac{1}{\beta}$ nagyságrendűek az $(n-2)$ -től független tagokhoz képest. Mivel $\beta_L = \frac{\beta'_L}{T_L}$ és $\gamma_L = \frac{\gamma'_L}{T_L} \left(\beta'_L + \gamma'_L = \frac{1}{4} \right)$, lásd az előző fejezetet), ezért (IV.22) és (IV.23) alacsony hőmérsékleti sorfejtést generál. A harmonikus rotátor esetében $\frac{\beta^*}{\gamma^*} = 2$ adódott. Könnyen belátható, hogy ez most is fennáll. A hőmérsékletre az

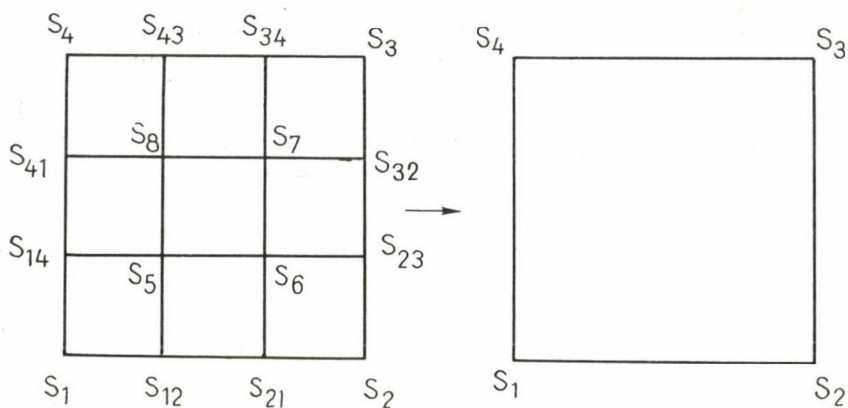
$$\frac{1}{T_{2L}} = \frac{1}{T_L} - \frac{(n-2)}{16} \quad (\text{IV.24})$$

rekurziós egyenletet kapjuk. Ezt megoldva

$$\frac{1}{T_L} = \frac{1}{T_a} - \frac{n-2}{16 \ln 2} \ln \frac{L}{a}, \quad (\text{IV.25})$$

ahol a a rácsállandó és T_a a hőmérséklet kezdeti értéke. (IV.25)-ben az $\ln 2$ tényező azzal kapcsolatos, hogy esetünkben a skálatranszformáció paramétere 2 volt, azaz a négyzet oldalait kétszeresére növeltük. Az $\ln \frac{L}{a}$ együtthatóját a chirális

térelmélet módszereivel is sikerült meghatározni [27], mely eredmény egzaktnak tekinthető. Természetesen szeretnénk eredményünket az egzakt értékkel összehasonlítani. Mivel azonban a térelméleti módszerekkel történő számolásnál a skálaparaméter értéke határértékben egységnyi, az összehasonlításnak csak akkor van értelme, ha mi is a skálaparaméter eme értékével dolgozunk. Az eredeti Migdal-módszerben [49] (lásd III/a és III/b fejezet) a rekurziós egyenleteket tetszőleges skálaparaméterre meg lehet oldani és a megoldásban a $b \rightarrow 1$ határátmenet elvégezhető (b a skálaparaméter). A jelen eljárásban ez minden további nélkül nem végezhető el. Ezért a következő módszert alkalmazzuk. A rekurziós egyenletet $b=3$ esetére is megoldjuk a fix pontban. Ha a fix pont értékek $b=3$ esetén nem nagyon különböznek a $b=2$ esetén kapottaktól, akkor feltételezhetjük, hogy a b függés nagyon gyenge, vagyis $b \rightarrow 1$ ugyanazt adja, mint $b=2$. A $b=3$ -hoz tartozó rekurziós egyenlet a 7. ábrán látható (legalacsonyabb rendű közelítés).



7. ábra. Elsőrendű közelítés $d=2, b=3$ esetén

Annak érdekében, hogy értelmes rekurziós egyenleteket kapjunk az $s_{12}, s_{21}, \dots, s_{14}$ spinek értékét (IV.3)-hoz hasonlóan rögzíteni kell. A (IV.3) feltétel jelen esetben a φ_i polár szögekre a (például)

$$\varphi_{12} = \frac{2\varphi_1 + \varphi_2}{3} \quad (\text{IV.26})$$

megszorítást adja.

$b=3$ esetben végezetül (IV.25) helyett az

$$\frac{1}{T_L} = \frac{1}{T_a} - \frac{(n-2) \cdot 2}{16,4 \cdot \ln 3} \ln \frac{L}{a} \quad (\text{IV.27})$$

egyenletet kapjuk. (IV.25) és (IV.27) összehasonlításából azt a következtetést vonhatjuk le, hogy valószínűleg nem vétünk nagy hibát, ha általános b esetben a rekurziós egyenletet az

$$\frac{1}{T_L} = \frac{1}{T_a} - \frac{n-2}{16} \frac{b-1}{\ln b} \ln \frac{L}{a} \quad (\text{IV.28})$$

alakban írjuk. Ekkor a $b \rightarrow 1$ határátmenet könnyen elvégezhető. A térelméleti módszerek [26, 27] $(n-2) \ln \frac{L}{a}$ együtthatójára az $1/2\pi$ értéket adják, mely nagyon messze van a (IV.28)-ból adódó $1/16$ értéktől.

Legalacsonyabb rendű közelítésünk tehát kvantitatíve nagyon gyenge eredményt adott. A következő közelítésnél a W_L funkcionál (IV.9) alakját kell használnunk. A számolás rendkívül elbonyolódik, de nem jár semmiféle elvi nehézséggel. A számolás részletei ismét az 56. hivatkozásban megtalálhatók. Ebben a közelítésben csak a $b=2$ esetet vizsgáltuk és feltettük, hogy ebből extrapolálhatunk a $b \rightarrow 1$ esetre. Ekkor az $(n-2) \ln \frac{L}{a}$ együtthatójára a 0,163 értéket kaptuk. Ez az érték mindössze 3%-ot tér el a $(2\pi)^{-1}=0,159$ egzakt értéktől. A Migdal által kapott számérték $1/6=0,167$. Azt látjuk tehát, hogy túlmenve a legalacsonyabb rendű közelítésen nagyobb pontosságot érhetünk el, mint amit az eredeti Migdal-módszerrel kaphatunk. Mivel az egyre magasabb rendű közelítések egyre jobban közelítik az eredeti partíciós funkcionált, ezért feltételezhetjük, hogy az eljárás pontossága tovább növelhető.

Mind ez ideig módszerünket két dimenziós rendszerekre alkalmaztuk. Az általánosított Heisenberg modell, vagy n vektor modell esetén azt várjuk, hogy kettőnél nagyobb dimenziószám esetén a ferromágneses átalakulás véges hőmérsékleten következik be. Más szóval $d > 2$ esetén (d a rendszer dimenziószáma) a (IV.24)-nek megfelelő rekurziós egyenletnek véges fix pontja lesz. Vizsgáljuk meg hogyan módosulnak eddigi eredményeink n vektor modell esetén $2+\varepsilon$ dimenzióban.

Mivel, mint már korábban említettük, a (IV.24) rekurziós egyenlet alacsony hőmérsékleti sorfejtést generál, ahol az $(n-2)$ -vel arányos tag kicsi a többi taghoz képest, ezért $2+\varepsilon$ dimenzióban ez a tag helyettesíthető két dimenzióban felvett értékével (amennyiben ε -ban legalacsonyabb rendben kívánunk számolni). Ezért az egyetlen tag, mely ε -tól függhet az $\frac{1}{T_L}$ inverz hőmérséklet. Mivel mi a W_L funkcionálokat mindig kvadrátikus függvényekkel helyettesítettük, ezért azt mondhatjuk, hogy az $\frac{1}{T_L}$ tag harmonikus szabadenergia függvényből adódott. (Hogy ez valóban így van, azt alátámasztja, hogy a csatolási állandók fix pontban felvett értékei a Laplace-egyenlet megoldásából, illetve az eme megoldással (IV.12)-ből számolt harmonikus szabadenergia függvényből is megkaphatók.) Ha az $\frac{1}{T_L}$ tag harmonikus szabadenergia függvényből származik, akkor b^ε -nal kell hogy skálázódjék [56]. Ez a folytonos modell esetén könnyen ellenőrizhető, ha a szabadenergia függvényt az $\int |\text{grad } \vec{s}(r)|^2 d^{2+\varepsilon}r$ kifejezéssel arányosnak vesszük. $\vec{s}(r)$ a folytonos spin-változó és $|\vec{s}(r)|^2=1$. A korábbi rekurziós egyenletek helyett végül $2+\varepsilon$ dimenzióban az

$$\frac{1}{T_{bL}} = \frac{b^\varepsilon}{T_L} - (n-2)K_b^N(b-1) \quad (\text{IV.29})$$

egyenletet kapjuk. Fentiben K_b^N értéke függhet a b skálaparamétertől és a közelítés

rendjétől (N -től). (IV.29) fix pont megoldása

$$\frac{1}{T^*} = \frac{n-2}{\varepsilon} K_b^N \frac{b-1}{\ln b} \quad (\text{IV.30})$$

amiből látható, hogy $d > 2$ esetén a rendszernek valóban van véges kritikus hőmérséklete. K_b^N értéke ugyanaz, mint (IV.28)-ban a második tag számfaktora (vagyis első közelítésben 16), így a második közelítésben értéke 0,163, míg az egzakt eredmény 0,159.

V. A MIGDAL-FÉLE ELJÁRÁS ALKALMAZÁSA DINAMIKUS KRITIKUS VISELKEDÉS TÁRGYALÁSÁRA

Mint a korábbiakban láttuk, sztatikus kritikus jelenségek vizsgálatakor az RSCSM alapvető tulajdonsága, hogy a rendszer partíciós függvénye a transzformáció során invariáns marad (I.3). Ez egyben megkötést is jelent a renormalizációs operátor analitikus alakjára nézve. Sajnos dinamikus jelenségek vizsgálatakor, az RSCSM fenti tulajdonsága nem jelent segítséget, illetve útmutatást. Ez volt egyik oka annak, hogy dinamika tárgyalására az RSCSM-et csak később kezdték alkalmazni. Dinamika leírására, az alapvető fizikai mennyiségek időbeli változását leíró mozgásegyenleteket kell megkonstruálni. Kvantum statisztika esetén ez elvben jól definiált eljárást jelent, hiszen ilyenkor a sűrűség mátrix kielégíti a megfelelő Schrödinger-egyenletet. (Schrödinger reprezentációban. Ugyanis Heisenberg reprezentációban a sűrűség-mátrix stacionárius [84].)

Az persze más kérdés, hogy ez a Schrödinger-egyenlet általában rendkívül bonyolult és csak közelítőleg oldható meg. Megmutatható [5], hogy kritikus jelenségek vizsgálatakor az esetek többségében a rendszer kvantumos tulajdonságai elhanyagolhatók és elegendő klasszikus mozgásegyenleteket tanulmányozni. A Schrödinger-egyenlet helyett ilyenkor a Liouville-egyenletet kéne megoldani. Mivel ez általános esetben rendkívül bonyolult (ekvivalens a makroszkopikus rendszer Hamilton-féle mozgásegyenlet rendszerének megoldásával), ezért inkább fenomenologikus mozgásegyenleteket konstruálunk. Statisztikus fizikai rendszerek valószínűségi eloszlásfüggvényének időbeli leírására gyakran a Master [85] és Fokker—Planck-egyenleteket [86] használják. Egy másik lehetőség, hogy közvetlenül a rendparaméter időbeli változását vizsgáljuk. Ekkor az alapvető mozgásegyenlet lehet a Langevin-egyenlet [86]. A renormalizációs transzformációtól ilyenkor azt követeljük meg, hogy a mozgásegyenlet alakját változtatlanul hagyja. A csatolási állandókra vonatkozó rekurziós egyenleteket ennek a követelménynek a segítségével kapjuk. Mivel az időbeli változások leírására különböző módszereket, mozgásegyenleteket választhatunk a renormalizációs transzformáció is függ a választott módszertől és így sokkal kevésbé egyértelmű, mint sztatikus esetben.

A renormalizációs transzformációt dinamika esetén is végezhetjük impulzus térben vagy valós térben. Amennyiben impulzus térben dolgozunk, kényelmes a Langevin-féle mozgásegyenletekből kiindulni. Halperin és Hohenberg, akik elsőként alkalmazták az RSCSM-et dinamikus kritikus jelenségek vizsgálatára a rendparaméterre vonatkozó Langevin-egyenletekből indultak ki és követve Wilson eredeti eljárását, egy sor modell dinamikáját [34] a négy dimenzió körüli ε sorfejtés ($\varepsilon = 4 - d$) segítségével írták le.

Valós térbeli RCSM esetén, mint látni fogjuk, célszerű a Master-egyenletből kiindulni és a transzformációt úgy megalkotni, hogy a Master-egyenlet alakja a transzformált változókban ugyanaz legyen, mint az eredeti változókban. A valós térbeli RCSM-et dinamika vizsgálatára először *Achiam* és *Kosterlitz* alkalmazták [44]. Ők Ising-spin rendszert tanulmányoztak és a szabadsági fokok redukcióját a Niemeyer és van Leeuwen-féle módszer [43] segítségével végezték el. Eredményeik, magas hőmérsékleti sorfejtésekkel összehasonlítva, elfogadhatóak voltak. Lényegesen pontosabb eredmények adódtak *Mazenko* és *munkatársai* munkáiból [45, 46]. Ez utóbbi kutatók eljárása már Ising-rendszerek esetén is rendkívül bonyolult és így kevés remény van arra, hogy realiztikusabb modellek (pl. Potts-modell) dinamikáját módszerükkel le lehessen írni.

Mint korábban láttuk, a Migdal-módszer nagy előnye éppen egyszerűségében rejlik. Kézenfekvő tehát megpróbálni ezt a módszert dinamikus kritikus jelenségek vizsgálatára általánosítani. A következőkben megmutatjuk, hogy ez az általánosítás valóban elvégezhető. Magát az általánosítást, részletesebben az Ising—Glauber-modell [58] példáján mutatjuk be, ahol is az eredmények nagypontosságú magas hőmérsékleti sorfejtésekkel hasonlíthatók össze [13, 87]. Később a Potts-modell dinamikáját vizsgáljuk [65]. A Potts-modell dinamikája analitikusan mind ez ideig csak az általunk kidolgozott módszerrel volt tanulmányozható. Végezetül pedig inhomogén (random bond) Ising-spin rendszer egy lehetséges dinamikai modelljét tárgyaljuk az általánosított Migdal-módszerrel [66].

V/a. A kinetikus Ising-modell

Ebben a fejezetben a Glauber-féle kinetikus Ising-modellen keresztül bemutatjuk, hogyan általánosítható a III. fejezetben részletesen ismertetett Migdal-módszer dinamikus kritikus jelenségek tárgyalására.

Legyen $P(\xi\sigma\xi, t)$ annak valószínűsége, hogy t időpillanatban a vizsgált Ising-rendszer spinjei a $\sigma_1, \sigma_2 \dots \sigma_N$ értékeket veszik fel. A P valószínűség eloszlás dt idő alatt változhat (csökkenhet), azért mert egyes spinek a σ_i állapotból a $-\sigma_i$ állapotba billenhetnek ($\sigma_i = \pm 1$), vagy azért (növekszik), mert egyes spinek a $-\sigma_i$ állapotból a σ_i állapotba juthatnak. P időbeli változására *Glauber* a következő Master-egyenletet írta fel [58]:

$$\tau_0 \frac{d}{dt} P(\xi\sigma\xi, t) = - \sum_i w(\sigma_i) P(\xi\sigma\xi, t) + \sum_i w(-\sigma_i) P(\xi\sigma\xi, -\sigma_i, t). \quad (\text{V.1})$$

Fentiben τ_0 az időskálát meghatározó paraméter, míg a w átmeneti valószínűség eleget tesznek a „részleges egyensúlyi” feltételnek, nevezetesen

$$w(\sigma_i) P_0(\xi\sigma\xi) = w(-\sigma_i) P_0(\xi\sigma\xi, -\sigma_i) \quad (\text{V.2})$$

ahol

$$P_0(\xi\sigma\xi) = Z^{-1} \exp \mathcal{H}(\xi\sigma\xi) \quad (\text{V.3})$$

az egyensúlyi Boltzmann-eloszlás, \mathcal{H} az Ising-modell Hamilton-operátora (szorozva $-\frac{1}{kT}$ -vel), Z pedig az Ising-modell partíciós függvénye. (V.2) nem határozza meg

egyértelműen az átmeneti valószínűségek analitikus alakját. Egy lehetséges választás

$$w(\sigma_i) = \frac{e^{-K\sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta}}}{e^{Kq}}. \quad (V.4)$$

Itt $K = \frac{J}{kT}$, $J > 0$ a ferromágneses csatolási állandó, q pedig a legközelebbi szomszédok száma, mely négyzet, illetve köbös rács esetén 4, illetve 6. Egy dimenzióban $q=2$. Az összegezés (V.4)-ben a σ_i spin legközelebbi szomszédjaira történik.

A következőkben használjuk az Achiam és Kosterlitz által alkalmazott lineáris válasz elméletet [44]. Tételezzük fel, hogy P felírható a

$$P(\xi\sigma\xi, t) = Z^{-1}(t) \exp[\mathcal{H}(\xi\sigma_i\xi, t)] \quad (V.5)$$

alakban, ahol időfüggő mágneses perturbáció esetén

$$\mathcal{H}(\xi\sigma\xi, t) = \frac{K}{2} \sum_{i,\delta} \sigma_i \sigma_{i+\delta} + h_0^M(t) \sum_i \sigma_i. \quad (V.6)$$

Időfüggő energiaszerű perturbáció esetén

$$\mathcal{H}(\xi\sigma\xi, t) = \frac{K}{2} \sum_{i,\delta} \sigma_i \sigma_{i+\delta} + \frac{h_0^E(t)}{2} \sum_{i,\delta} \sigma_i \sigma_{i-\delta}. \quad (V.7)$$

Lineáris válasz elmélet keretén belül az (V.1) Master-egyenlet mágneses perturbáció esetén a

$$\tau_0 \frac{d}{dt} P^M = -2h_0^M(t) \sum_i w(\sigma_i) \sigma_i Z^{-1} \exp\left[+\frac{K}{2} \sum_{j,\delta} \sigma_j \sigma_{j+\delta}\right] \quad (V.8)$$

míg energiaszerű perturbáció esetén a

$$\tau_0 \frac{d}{dt} P^E = -h_0^E(t) \sum_i w_i(\sigma_i) \sigma_i \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} Z^{-1} \exp\left[+\frac{K}{2} \sum_{j,\delta} \sigma_j \sigma_{j+\delta}\right] \quad (V.9)$$

alakban írható. Vegyük észre, hogy mivel P -t (V.5) adja, ahol \mathcal{H} -t az (V.5) és (V.7) kifejezések definiálják, ezért (V.8) és (V.9)-ben Z h függése elhanyagolható.

Tegyük fel, hogy az (V.8) és (V.9) Master-egyenletek L lineáris méretű blokk (két dimenzióban négyzet, három dimenzióban kocka) esetén is érvényesek. Átlagoljuk (integráljuk) (V.8) és (V.9) mindkét oldalát a blokk belsejében levő spinekre. (II.1), (II.4) és (V.4) alapján ekkor a következő egyenleteket kapjuk:

$$\tau_0 \frac{d}{dt} W_L^M = -2h_0^M(t) \sum_{i \in H} \sigma_i \sum_{\xi \in B} \xi \left[w(\sigma_i) Z_L^{-1} \exp\left(\frac{K}{2} \sum_{j,\delta} \sigma_j \sigma_{j+\delta}\right) \right] \quad (V.10)$$

$$\tau_0 \frac{d}{dt} W_L^E = -h_0^E(t) \sum_{i \in H} \sigma_i \sum_{\xi \in B} \xi \left[W(\sigma_i) \sum_{\delta} \sigma_{i+\delta} (Z_E^{-1} \exp\left(\frac{K}{2} \sum_{j,\delta} \sigma_j \sigma_{j+\delta}\right)) \right] \quad (V.11)$$

Itt W a (II.4) által definiált funkcionál, $\sum_{i \in H}$ a határspinekre történő összegezést jelenti. Nyilvánvaló, hogy a határon levő spineknek kevesebb legközelebbi szomszéd-

juk van, mint a blokk belsejében levő társaiknak. Ezt majd a fenti egyenletek jobb oldalára vonatkozó rekurziós egyenletek felírásánál figyelembe kell venni.

A továbbiakban, a szemléletesség kedvéért korlátozódjunk két dimenzióra. A II. fejezetben ismertetettek alapján a Migdal-közelítés egyik lényeges feltevése, hogy az L oldalhosszúságú négyzet egyes élei mentén elhelyezkedő spinek párhuzamosak (ferromágneses rendszer esetén) és ezért helyettesíthetők egyetlen átlagos spinnel. Ez látható a 3. ábrán. Ezért egy adott él esetén

$$\sum_{i \in H_s} \sigma_i \sum_{\xi \in \sigma_B} \rightarrow \sigma_s \sum_{i \in H_s} \sum_{\xi \in \sigma_B} \quad (\text{V.12})$$

ahol H_s a kiválasztott élt jelenti, míg σ_s az adott élhez tartozó átlagos spin. Két dimenzióban a $\sum_{i \in H}$ összeg 4 (d dimenzióban $2d$) különálló tagra bontható, ahol az egyes tagok a Migdal-közelítés során bevezetett $4(2d)$ átlagos spinnek felelnek meg. Az egyes tagok, melyek maguk is összegek $L(L^{d-1})$ további tagot tartalmaznak. Más szóval (V.12)-ben a $\sum_{i \in H_s}$ összeg $L(L^{d-1})$ tagot tartalmaz. Ha (V.12)-ben $\sum_{\xi \in \sigma_B}$ független lenne i -től, akkor $\sum_{i \in H_s}$ mindössze egy $L(L^{d-1})$ szorzót jelentene és két dimenzióban (V.10) például a

$$\tau_0 \frac{d}{dt} W_L^M = -2h_0^M(t) L \sum_{\eta=1}^4 \sigma_\eta Q_L(\sigma_\eta) \quad (\text{V.13})$$

alakba lenne írható, ahol

$$Q_L(\sigma_\eta) = \sum_{\xi \in \sigma_B} W(\sigma_\eta) z_L^{-1} \exp \left(\frac{K}{2} \sum_{j, \delta} \sigma_j \sigma_{j+\delta} \right). \quad (\text{V.14})$$

Ily módon a Master-egyenletben egy extra L szorzó jelenik meg, mely megváltoztatná a rendszer időskáláját (anélkül, hogy bármiféle renormalizációs transzformációt végeztünk volna). Fizikailag ez könnyen érthető. Ha minden határspin egyforma, legyen σ , akkor L módon változtathatjuk meg a határspinek konfigurációját. Nevezetesen úgy, hogy az L határspin közül valamelyiket átbillentjük. A Migdal-közelítésben, ha valamelyik határspint átbillentjük, akkor ez azt jelenti, hogy az átlagos spint is átbillentettük.

Alkalmazzuk a (II.9) faktorizációs feltevést. Ekkor az (V.10) és (V.11) egyenletek a

$$\tau_0 \frac{d}{dt} W_L^M = \frac{-2h_L^M L Q_L^M}{e^{K_L}(4 \cos h K_L)} [(\sigma_1 + \sigma'_1) F_L(\sigma_2 + \sigma'_2) + (\sigma_2 + \sigma'_2) F_L(\sigma_1 \sigma'_1)] \quad (\text{V.15})$$

$$\tau_0 \frac{d}{dt} W_L^E = \frac{-h_L^E L Q_L^E}{e^{K_L}(4 \cos h K_L)} [\sigma_1 \sigma'_1 F_L(\sigma_2 \sigma'_2) + \sigma_2 \sigma'_2 F_L(\sigma_1 \sigma'_1)] \quad (\text{V.16})$$

alakba írhatók. Itt kihasználtuk az átmeneti valószínűség konkrét (V.4)-gyel megadott alakját. Nyilvánvaló, hogy (V.15) és (V.16) jobb oldala a bevezetett Q arányossági tényezővel a legáltalánosabb, amit a Migdal-közelítésben fel lehet írni. Látható, hogy a (V.13) és (V.14)-ben bevezetett Q_L a Migdal-közelítésben valóban független a határspinektől (az i indextől (V.12)-ben). Vegyük azt is észre, hogy

a határspineknek csak egy „legközelebbi szomszédja” van, ezért szerepel az (V.15) és (V.16) egyenletekben e^{K_L} e^{K_q} helyett.

Definiáljuk a

$$\hat{\tau}_L^M = \frac{\tau_0}{L\varrho_L^M} \quad (\text{V.17})$$

$$\hat{\tau}_L^E = \frac{\tau_0}{L\varrho_L^E} \quad (\text{V.18})$$

mennyiségeket. Mint már említettük a fenti módon definiált $\hat{\tau}$ mennyiségek nem a fizikailag releváns mennyiségek.

A Migdal-közelítésben valójában a négyzet egyes élein levő L darab párhuzamos spin „klaszter”-jével van dolgunk. $\hat{\tau}$ az ilyen „klaszterekből” álló rendszer relaxációs ideje. Annak érdekében, hogy az egyes spinek relaxációs idejét, vagyis a fizikailag érdekes mennyiségeket megkapjuk, végül is a

$$\tau_L^M = L\hat{\tau}_L^M \quad (\tau_{bL}^M = bL\hat{\tau}_{bL}^M) \quad (\text{V.19})$$

$$\tau_L^E = L\hat{\tau}_L^E \quad (\tau_{bL}^E = bL\hat{\tau}_{bL}^E) \quad (\text{V.20})$$

mennyiségeket kell meghatároznunk.

A továbbiakban először a mágneses perturbáció esetével foglalkozunk. Ekkor a Master-egyenlet, melyre a renormalizációs operátort kívánjuk hattan

$$\hat{\tau}_L^M \frac{d}{dt} W_L^M = - \frac{2h_L^M}{e^{K_L}(4 \cos hK_L)} \Pi_L^M. \quad (\text{V.21})$$

Itt Π_L^M az (V.15) jobb oldalán, a négyzetes zárójelben megadott kifejezés.

Vizsgáljuk a renormalizáció hatását $b=2$ esetén. A Migdal-féle eljárás értelmében kombináljunk össze négy L élhosszúságú négyzetet és integráljuk a Master-egyenlet mindkét oldalát a közös éleken elhelyezkedő spinek szerint. (Lásd 3. ábra.) Mivel

$$W_{2L}^M = \frac{\sum_{s_1} \sum_{s_2} \sum_{s_3} \sum_{s_4} W_L^M(\text{I}) W_L^M(\text{II}) W_L^M(\text{III}) W_L^M(\text{IV})}{\left\langle \sum_{s_1} \sum_{s_2} \sum_{s_3} \sum_{s_4} W_L(\text{I}) W_L(\text{II}) W_L(\text{III}) W_L(\text{IV}) \right\rangle} = \frac{R_2(W_L^M)}{\langle R_2(W_L) \rangle} \quad (\text{V.22})$$

ezért (V.22)-t behelyettesítve a $2L$ élhosszúságú négyzetre vonatkozó (V.21) egyenletbe és differenciálva (V.22) számlálójának minden tényezőjét, végül is

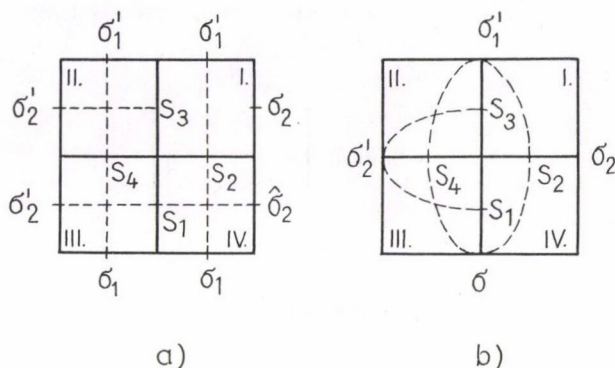
$$W_{2L}^M = C^M \sum_{s_1 s_2 s_3 s_4} \Pi_L^M(\text{I}) W_L(\text{II}) W_L(\text{III}) W_L(\text{IV}) + \dots + W_L(\text{I}) W_L(\text{II}) W_L(\text{III}) \Pi_L^M(\text{IV}). \quad (\text{V.23})$$

A fenti (V.21)–(V.23) egyenletekben W_L^M tartalmazza h_L^M -et, de W_L a $h_L^M=0$ esetben vett kifejezést jelenti. Ez megtehető, mivel h -ban elsőrendig számolva (V.15)-ből könnyen belátható, hogy (V.22) nevezőjének deriváltja nem adna járulékot.

$$C^M = \frac{\hat{\tau}_{2L}^M h_L^M e^{K_{2L}} \cos(K_{2L})}{\hat{\tau}_L^M h_{2L}^M e^{K_L} \cos h(K_L)} \frac{1}{\langle R(W_L) \rangle} \quad (\text{V.24})$$

adódik. Könnyen láthatjuk azonban, hogy (V.23) nem lehet a helyes rekurziós egyenlet Π -re. Hogy jobban megértsük miről van szó, vizsgáljuk meg (V.23) első tagját. A 8. ábráról látható, hogy

$$\Pi_L^M(I) = (s_3 + \sigma_2)F_L(\sigma'_1 s_2) + (s_2 + \sigma'_1)F_L(s_3 \sigma_2). \quad (V.25)$$



8. ábra. A Master-egyenlet jobb oldalának renormalizációs csoport transzformációja

Az átmeneti valószínűség választott alakja miatt s_3 nem csatolódhat legközelebbi szomszédjaihoz, melyek a mi esetünkben σ_2 és σ'_2 . Ugyanúgy s_2 sem csatolódhat σ_1 és σ'_1 -hez. Ezért, amikor (V.23) első tagjában elvégezzük az s_3 és s_2 szerinti átlagolást, zérust kellene kapnunk, hiszen $\sum_{\xi s_3 \xi} s_3 = +1 - 1 = 0$. Hogy ez teljesüljön, ezért (V.23)-ban (V.25) helyett elegendő a

$$\Pi_L^M(I) = \sigma_2 F_L(\sigma'_1 s_2) + \sigma'_1 F_L(s_3 \sigma_2) \quad (V.26)$$

kifejezést használni. Ha (V.26) első tagját vesszük figyelembe a rekurziós egyenlet a 8. ábrával illusztrálható, melyen a szaggatott vonal a megfelelő F_L tényezőt jelenti. Vegyük észre, hogy σ_2 nem csatolódik legközelebbi szomszédjaihoz. s_1 legközelebbi szomszédja $\hat{\sigma}_2$ -nek. De ha $\sigma_2 = \hat{\sigma}_2$ a Migdal-közelítés értelmében, akkor s_1 legközelebbi szomszédja lesz σ_2 -nek. Így s_1 és σ_2 ($= \hat{\sigma}_2$) nem csatolódhatnak egymáshoz és a rekurziós egyenlet a 8.b ábra szerinti kell legyen.

Elvégezve a konkrét számolást testszöveges d dimenzióban és b skálaparaméterrel, és megkövetelve, hogy (V.21) alakja ugyanaz legyen L és bL élhosszúságú blokkok esetén, végül is az

$$1 = \frac{\hat{\tau}_{bL}^M h_L^M e^{K_{bL}}}{\hat{\tau}_L^M h_{bL}^M e^{K_L}} \cdot b^{d-1} \left[\frac{1 - \tanh^2 K_L}{1 - \tanh^{2b} K_L} \right]^{b \frac{d-1}{2}} \quad (V.27)$$

rekurziós egyenlet adódik. Felhasználva (II.14)-et, (II.18)-at, (II.19)-et és (V.19)-et

nagy L -re a dinamikus skalárhipotézis alapján [15]

$$\frac{\tau_{bL}^M}{\tau_L^M} = b^{d-d} \left[\frac{1 - \tanh^2 K^*}{1 - \tanh^2 \frac{K^*}{b^{d-1}}} \right]^{-b \frac{d-1}{2}} = b^{z_M} \quad (\text{V.28})$$

adódik, ahol $K^* d = \theta$ és $b \rightarrow 1$ esetén (II.15) által van meghatározva. Végezetül

$$z_M = d - \Delta + \pi_M \quad (\text{V.29})$$

ahol

$$\pi_M = \frac{b^{d-1}}{\ln b} \ln \left[\frac{\cosh K^*}{\cosh \left(\frac{K^*}{b^{d-1}} \right)} \right] \quad (\text{V.30})$$

$d=2$ és $b \rightarrow 1$ esetén tehát

$$\pi_M = 0,183 \quad (\text{V.31})$$

és így

$$z_M = 2,064. \quad (\text{V.32})$$

Az (V.30) formulának van egy igen érdekes tulajdonsága. A $b \rightarrow 1$ határesetben π_M független a b^{d-1} tényezőtől. Ha ezt a tényezőt elhagyjuk (V.30)-ból, akkor ugyanazt a dualitási tulajdonságot kapjuk, mely a szatikus Migdal-formulákra volt jellemző (lásd II. fejezet), nevezetesen (V.30) invariáns lesz a $b' = 1/b$, $K' = b^{1-d}K$ transzformációval szemben.

A számolás, energiaszerű perturbáció esetén hasonló módon végezhető el. A renormalizációs operátort ekkor az alábbi egyenletre hattatjuk:

$$\hat{\tau}_L^E \frac{d}{dt} w_L^E = \frac{-h_L^E}{e^{K_L} (\cosh K_L)} \Pi_L^E. \quad (\text{V.33})$$

Itt Π_L^E az (V.16) négyzetes zárójelében szereplő kifejezés. Π_L^E -re a rekurziós egyenletet a korábbiakhoz hasonlóan konstruálhatjuk meg. (V.25) helyett most

$$\Pi_L^E(I) = s_3 \sigma_2 F_L(\sigma'_1 s_2) + s_2 \sigma'_1 F_L(s_3 \sigma_2). \quad (\text{V.34})$$

A számolást általános d -re és b -re elvégezve, végül is

$$z_E = d - \Delta' + \pi_E \quad (\text{V.35})$$

adódik, ahol Δ' -t (II.16) adja meg. (V.35) levezetésekor felhasználtuk a

$$h_{bL}^E = b^{1/\nu} h_L^E \quad (\text{V.36})$$

rekurziós összefüggést [88]. (V.35)-ben

$$\pi_E = \pi_M + \frac{1}{\ln b} \ln \frac{\tanh K^*}{\tanh \left(\frac{K^*}{b^{d-1}} \right)} \quad (\text{V.37})$$

π_E értéke $b=1$ esetén független a π_M -ben szereplő b^{d-1} faktortól, és ha azt el-

hagyjuk

$$\pi_E = \frac{1}{\ln b} \ln \frac{\sinh K^*}{\sinh \left(\frac{K^*}{b^{d-1}} \right)} \quad (\text{V.38})$$

$d=2$ és $b \rightarrow 1$ esetén

$$\pi_E = 1,065 \quad (\text{V.39})$$

vagyis

$$z_E = 1,819. \quad (\text{V.40})$$

Nyilvánvalóan (V.38) is rendelkezik a dualitási tulajdonsággal.

Azt várjuk, hogy $z_M = z_E$ [64, 105]. Hogy ez nincs így, valószínűleg annak a következménye, hogy Δ' messze van az egzakt értéktől. Ezt a sejtést alátámasztja, hogy ha Δ -ra és Δ' -re az egzakt eredményeket használjuk $z_E - z_M = 0,007$. Végezetül tehát azt mondhatjuk, hogy a Migdal-módszernek, a két dimenziós kinetikus Ising-modell kritikus dinamikai leírására történő általánosításával a z dinamikus kitevőre a magas hőmérsékleti sorfejtéssel [13, 87] és Monte Carlo-módszerrel [89, 90] kapott eredményekhez nagyon közelít kapunk. Eljárásunk hasonlít az eredeti, sztatikára kidolgozott Migdal-módszerhez. Ugyanakkor jól látszik, hogy a sztatikus esetben használt közelítéseknek a dinamika esetén sokkal komolyabb következményei vannak. Mivel az eljárás relatíve egyszerű, számos egyéb modellre is alkalmazható. A következő fejezetben a Potts-modell dinamikáját vizsgáljuk.

V/b A Potts-modell

A két dimenziós Ising-modell egyike azon kevés magasabb dimenziójú statisztikus fizikai rendszernek, melyeknek egzakt megoldása ismeretes. Ez a tény, valamint az Ising-modell rendkívüli egyszerűsége nagyon alkalmassá teszik arra, hogy különböző matematikai módszerek próbaköveként szolgáljon. Mi is az előző fejezetben a dinamikára általánosított Migdal-módszert az Ising-modellre dolgoztuk ki. Sajnos, azonban ez a modell reális fizikai rendszereket nem képes leírni. Az Ising-modell általánosításának tekinthető Potts-modell [90] viszont úgy tűnik, alkalmas bizonyos kísérleti eredmények interpretálására.

Grafít rétegre párologtatott nemesgázok fizikai tulajdonságainak vizsgálata az utóbbi időben vált nagy jelentőségűvé. Ez annak a következménye, hogy az ilyen rendszerek lehetővé teszik két dimenziós magasabbrendű fázisátalakulások kísérleti tanulmányozását. Annak érdekében, hogy ezeket a rendszereket elméleti úton is vizsgálni lehessen, több kutató Potts-rács modelleket szerkesztett háromszög rácson [51, 92, 69]. Alkalmazva a Migdal-módszert ezen Potts-modellekre [51] a kísérleti eredményekkel összhangban levő eredmények adódtak.

A kísérletek ez ideig a grafitrétegre párologtatott nemesgáz rendszerek sztatikai tulajdonságait vizsgálták [94–98].

Időtől függő jelenségek tanulmányozása ezen rendszerekben lehetővé tenné, hogy sokkal többet tudhassunk meg a két dimenziós dinamikus kritikus jelenségekről. Hogy az ilyen kísérleti kutatásokat bátorítsuk, az előző fejezetben bemutatott dinamikára általánosított Migdal-módszert alkalmaztuk a Potts-modellre. Jelen fejezetben röviden ismertetjük a módszert Potts-modell esetében és megadjuk a Potts-modell dinamikus kritikus exponensét.

A Potts-modell Hamilton-operátora [91] a

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,\delta} \delta_{\sigma_i \sigma_{i+\delta}} \quad (\text{V.41})$$

kifejezés. Itt a σ_i „spinek” q darab különböző értéket vehetnek fel (q állapotú Potts-modell) és δ_{ab} a szokásos Kronecker-szimbólum. A Potts-modell particiósfüggvényét két dimenzióban mind a mai napig nem sikerült egzaktul meghatározni. Dualitásból viszont pontosan tudjuk tetszőleges q -ra az átmeneti hőmérséklet értékét [51]. A dualitási transzformáció azonban nem ad információt arra nézve, milyen rendű a fázisátalakulás. *Baxter*nek sikerült egzaktul kimutatnia [99], a modell teljes megoldása nélkül, hogy két dimenzióban $q \leq 4$ esetén a fázisátalakulás másodrendű, míg $q > 4$ esetén elsőrendű. A Potts-modellre korábban alkalmazott renormalizációs csoport módszerek, így a Migdal-módszer [100, 101] nem voltak képesek a fázisátalakulás rendjének eme ugrásszerű változását reprodukálni. Nem régen *Nienhuis és munkatársai* olyan RSCM-et dolgoztak ki, mely az (V.41)-nél általánosabb Hamilton-operátorra alkalmazva már megadta a *Baxter* által kapott eredményt [102]. A *Nienhuis és munkatársai* által használt Hamilton-operátor speciális esetként tartalmazza (V.41)-et és univerzalitási megfontolások alapján azt várjuk, hogy az általános és (V.41)-gyel megadott Hamilton-operátor ugyanazon kritikus viselkedést írja le. Amennyiben a II. fejezetben ismertetett Migdal-módszert (V.41)-re alkalmazzuk, csak a $q \rightarrow \infty$ esetben kapunk elsőrendű fázisátalakulást [100]. A Potts-modell dinamikai tárgyalásánál mégis (V.41)-ből indulunk ki. Ennek oka a következő. *den Nijs* [103], a *Baxter*-modellből kiindulva, melynek ismeretes egzakt megoldása [104] sejtést adott a $q=3$ és 4 állapotú Potts-modell kritikus exponenseire. Numerikus eredmények azt látszanak igazolni, hogy ez a sejtés a Potts-modell egzakt kritikus exponenseit reprodukálja [102]. Ha a *den Nijs*-sejtésből adódó értékeket összehasonlítjuk a Migdal-módszerrel kapott értékekkel, azt látjuk, hogy az egyezés mágneses exponensek esetében jó (ugyanúgy, ahogy (II.20) eltérése az egzakt értéktől kevesebb mint 10%). Az egyezés q növelésével romlik, ami nem meglepő, hiszen a Migdal-módszer $q > 4$ -re már kvalitatíve is helytelen eredményt ad. Azt mondhatjuk tehát, hogy noha a Migdal-módszerről tudjuk, hogy $q > 4$ -re rossz eredményt ad, $q \leq 4$ -re a kritikus exponensek numerikus értékét viszonylag pontosan reprodukálja. Figyelembe véve a mérési eredmények pontosságát, főleg a dinamikus kritikus exponens esetén, azt remélhetjük, hogy a módszerünkkel adódó dinamikus kritikus exponens összhangban lesz a mérési eredményekkel. Ezt különösen akkor várjuk, ha z kifejezésének azon részét, mely a sztatika eredménye, a *den Nijs*-féle sejtésből adódó és egzaktnak vélt értékkel helyettesítjük.

Természetesen Migdal-féle eljárásunkat alkalmazhatjuk a *Nienhuis és munkatársai* által használt, (V.41)-nél általánosabb Potts-rács modellre is, de a számolás bonyolultsága miatt ezzel itt nem foglalkozunk.

Annak érdekében, hogy az (V.41) által megadott Potts-modell dinamikáját tárgyalhassuk, az alábbi Master-egyenletből indulunk ki

$$\tau_0 \frac{d}{dt} P(\xi \sigma \xi, t) = \sum_i \sum_{\xi \hat{\sigma}_i \xi} [-w(\sigma_i \rightarrow \hat{\sigma}_i) P(\xi \sigma \xi, t) + w(\hat{\sigma}_i \rightarrow \sigma_i) P(\xi \sigma \xi, \hat{\sigma}_i, t)]. \quad (\text{V.42})$$

Az itt használt szimbólumok jelentése ugyanaz, mint (V.1)-ben. Az egyetlen eltérés abból adódik, hogy most σ nem csak a ± 1 értéket veheti fel, hanem q különböző értéke lehet. $q=2$ esetén a fenti egyenlet éppen (V.1)-et adja. (Igaz, hogy $\sum_{\xi \hat{\sigma}_i \xi} \hat{\sigma}_i$ valamennyi, tehát q darab értékére vonatkozó összegezést jelent, de ha $\hat{\sigma}_i = \sigma_i$, akkor az egyenlet jobb oldala azonosan zérus.) A w átmeneti valószínűségeket ismét úgy választjuk meg, hogy eleget tegyenek az (V.2) „részleges egyensúlyi” feltételnek. Ezután ismét a lineáris válasz elméletet alkalmazzuk, vagyis P -t a következő alakban vesszük fel:

$$P(t) = Z^{-1} \exp \left[\frac{1}{2} K \sum_{i,w} \delta_{\sigma_i \sigma_{i+w}} \right] \left[1 + \frac{1}{2} h(t) \sum_{j,w} \delta_{\sigma_j \sigma_{j+w}} \right]. \quad (\text{V.43})$$

Jelen fejezetben csak az energiaszerű perturbáció esetével foglalkozunk, mivel mágneses perturbáció esetén a számolás lényegesen bonyolultabb. (V.43)-at (V.42)-be írva, a h -ban lineáris Master-egyenlet

$$\tau_0 \frac{d}{dt} P(\xi \sigma \xi, t) = \frac{h(t)}{2} \sum_i \sum_{\xi \hat{\sigma}_i \xi} [w_i(\sigma_i \rightarrow \hat{\sigma}_i) \sum_w \delta_{\sigma_i \sigma_{i+w}}] P_0(\xi \sigma \xi). \quad (\text{V.44})$$

Ismét feltesszük, hogy (V.41) L élhosszúságú blokkra érvényes. Követve az előző fejezetben leírtakat, végeredményben a következő rekurziós egyenletet kapjuk:

$$\tau_{bL} = \frac{h_{bL}}{h_L} C(K^*, q) \tau_L \quad (\text{V.45})$$

ahol C csak K fix pontbeli értékétől és q -tól függ. Mivel ugyanúgy, mint az Ising-modell esetén h_{bL} és h_L értékét ugyanazon időpillanatban vesszük, arányukra használhatjuk a sztatikus eredményt, vagyis

$$\frac{h_{bL}}{h_L} = b^{1/\nu} \quad (\text{V.46})$$

K^* és ν értékét, $d=2$ és $b \rightarrow 1$ esetén először Stephen [100] határozta meg. Eszerint

$$K^* = \ln(1 + \sqrt{q}) \quad (\text{V.47})$$

$$\nu^{-1} = 2[1 - \ln(1 + \sqrt{q})/\sqrt{q}]. \quad (\text{V.48})$$

(V.47) megegyezik a Potts által dualitás segítségével kapott eredménnyel [91]. A dinamikus skálahipotézis szerint $\tau_{bL} = b^z \tau_L$ és így

$$z = \nu^{-1} + \frac{2 + \sqrt{q}}{2\sqrt{q}} \ln(1 + \sqrt{q}) \quad (\text{V.49})$$

$q=2$ esetén (V.49) megegyezik (V.35)-tel. Mint már említettük, a Migdal-eljárás a (V.49)-ben szereplő ν értékét nem túl pontosan adja, (ellentétben d -val) ezért ν értékét helyettesíthetjük a den Nijs által kapott eredménnyel. A különböző módokon számolt z exponens numerikus értékét, q függvényében az 1. táblázat tartalmazza. A táblázatban szereplő z_1 a dinamikus exponens (V.49) és (V.48) segítségével kapott értéke, míg z_2 esetén ν értékét a den Nijs-féle sejtésből határozzuk meg.

1. TÁBLÁZAT

Különböző módszerekkel számolt kritikus exponensek a Potts-modellben. „a” a 13. „b” a 87 hivatkozást jelenti

Exponensek	$q = 2$			$q = 3$		$q = 4$	
	Migdal módszer	Egzalt	Sorfejtés	Migdal módszer	Sejtés	Migdal módszer	Sejtés
ν^{-1}	0,75	1		0,840	$\frac{6}{5}$	0,900	$\frac{3}{2}$
Z_1	1,819		2,135 ^a	1,922		2	
Z_2	2,065		2,00 ^b	2,25		2,55	

V/c. Az inhomogén Ising-modell és az Ising-spin üveg

A dolgozat valamennyi eddigi fejezetében homogén, transzlációval szemben invariáns rendszerekkel foglalkoztunk. Az utóbbi évek szilárdtest fizikájában és statisztikus mechanikájában azonban egyre nagyobb szerepet kapnak az inhomogén (random) rendszerek és érdemes megvizsgálni, vajon mondhatunk-e valamit ezen rendszerek dinamikai viselkedéséről a dinamikára általánosított Migdal-módszer segítségével? Random-spin rendszeren jelen fejezetben olyan modellt fogunk érteni, melyben a spinek közötti csatolási állandók meghatározott valószínűségi eloszlással rendelkező valószínűségi változók. Az ilyen rendszerek partíciós függvénye, vagyis a spinekre kiintegrált Boltzmann-faktor, függvénye eme valószínűségi változóknak. Amennyiben a rendszer szabadenergiáját úgy határozzuk meg, hogy először a valószínűségi változóktól függő partíciós függvényt átlagoljuk és utána vesszük logaritmusát, úgynevezett „hőtemperált” (annealed) átlagolást végeztünk, míg ha előbb vesszük a logaritmust és utána átlagolunk, „túlhűtött” (quenched) átlagolást hajtottunk végre.

Az első eset nem lényegesen különbözik a homogén rendszereknél alkalmazott eljárástól, hiszen ha a valószínűségi változókat extra szabadsági fokoknak tekintjük (a spinek mellett), akkor ezek a spin változókkal analóg módon kezelhetők. A második eset azt jelenti, hogy a valószínűségi változókkal reprezentálható szabadsági fokok sokkal lassabban változnak mint a spinek és ezért a spinátlagolást a valószínűségi változók egy, jól meghatározott konfigurációjára kell elvégezni, majd az így adódó szabadenergiát kell átlagolni a valószínűségi eloszlás szerint [16]. Az eljárás nagyon hasonlít a szilárdtesteknél alkalmazott adiabatikus közelítéshez, amikor is az elektronok mozgását először a sztatikusnak tekintett ionok adott konfigurációjához tartozó potenciáltérben tanulmányozzuk és az ion mozgást csak később vesszük figyelembe [106].

A „túlhűtött” átlagot sokkal nehezebb kiszámítani, mint a „hőtemperált” átlagot és az utóbbi években sok próbálkozás történt minél pontosabb közelítő eljárások kidolgozására. Az egyik legelterjedtebb módszer „hőtemperált” átlag kiszámítására a „replika trükk” [107–117].

Jelen fejezetben nem lesz szükségünk ilyen közelítő eljárásokra, mert a Migdal-féle közelítések után hátramaradó átlagokat analitikusan el tudjuk végezni.

Induljunk ki a következő Hamilton-operátorból:

$$\frac{H}{kT} = -\frac{1}{2} \sum_{i,\delta} K_{i,i+\delta} \sigma_i \sigma_{i+\delta} - h^0 \sum_i \sigma_i. \quad (\text{V.50})$$

Fentiben $K_{i,j}$ valószínűségi változók, míg h^0 állandó mágneses tér, mely azonban a renormálás során általában inhomogénné válik. A különböző random modell elnevezések attól függenek, milyenek választjuk $K_{i,j}$ eloszlását. Jelen dolgozatban két eloszlást tanulmányozunk. Ha $K_{i,j}$ $P(K_{i,j})$ eloszlása

$$P(K_{i,j}) = p\delta(K_{i,j} - K^0) + (1-p)\delta(K_{i,j}) \quad (\text{V.51})$$

és $K^0 > 0$, akkor a modellt „hígított” vagy egyszerűen random ferromágneses Ising-modellnek nevezzük. Ha

$$P(K_{i,j}) = p\delta(K_{i,j} - K^0) + (1-p)\delta(K_{i,j} + K^0), \quad (\text{V.52})$$

akkor a modell az Ising-spin üveg. A spin üveg elnevezés eléggé ellentmondásos az irodalomban. Alá kívánjuk húzni, hogy számunkra ez pusztán elnevezés, mely (V.52)-t jelenti és nem valamiféle konkrét anyagra vonatkozik. Az (V.50)–(V.52) által definiált modellek sztatikáját Jayaprakash és munkatársai tanulmányozták a Migdal-módszer segítségével [52, 73]. Eljárásuk lényege az, hogy a valószínűségi eloszlásokat minden egyes iterációs lépés után (V.51) és (V.52)-höz hasonló „dupla delta függvény” alakúnak választották és így a p -re és K^0 -ra vonatkozó rekurziós egyenleteket könnyen le tudták olvasni. Random Ising-modell esetén azt kapták [52], hogy az egyetlen instabil fix pont (mely magasabbrendű fázisátalakulást reprezentálhat) $p^* = 1$ és $(K^0)^* = K_c$, ahol K_c a homogén Ising-modell kritikus hőmérséklete. Ez azt jelenti, hogy a csatolási állandók random volta, akármilyen dimenzióról is van szó, nem változtatja meg a homogén Ising-modell kritikus viselkedését. Ez az eredmény ellentétben van a Harris-kritériummal [118], mely szerint ha a homogén rendszer α kritikus exponense pozitív a „szennyezés” (a csatolási állandók random volta) megváltoztatja a homogén rendszer kritikus viselkedését. A Harris-kritérium két dimenzióban nem ad határozott jóságot, mivel $\alpha = 0$ (az egzakt eredmény). Jayaprakash és munkatársai eredménye azonban lehet jó két dimenzióban, mivel a Migdal-eljárásból $\alpha < 0$ adódik és így a Harris-kritérium alapján nem is várjuk, hogy a „szennyezés” megváltoztassa a homogén rendszer kritikus viselkedését.

A spin üveg esetében Jayaprakash és munkatársai azt kapták, hogy $p^* = \frac{1}{2}$ tetszőleges dimenzióban [73]. Általános megfontolások alapján [119, 120] azt várjuk, hogy az Ising spin üveg alsó kritikus dimenziószáma kettő és így nem várunk fix pont megoldást $d=2$ esetén. Jayaprakash és munkatársai eredményeinek fenti hiányosságai könnyen kiküszöbölhetők, ha nem követeljük meg, hogy az (V.51) és (V.52) valószínűségi eloszlások minden iteráció után „dupla delta függvény” alakúak legyenek. Ha a teljes valószínűségi eloszlással kívánunk dolgozni, akkor azonban a számolások csak numerikusan, számítógép segítségével végezhetők el. Ilyen számolást Kirkpatrick végzett [72].

Jelen fejezetben a két dimenziós random Ising-modell és a három dimenziós Ising-spin üveg dinamikáját vizsgáljuk. Ezekben az esetekben nem vétünk nagy hibát, ha megköveteljük az eloszlásfüggvények „dupla delta függvény” alakját.

Mind a kinetikus Ising-modell, mind a Potts-modell dinamikájának tárgyalá-

sakor szükségünk volt a sztatikus renormalizációs transzformáció fix pontjának ismeretére, illetve a sztatikus kritikus exponensek értékére. Az eredeti Migdal-módszert (melyet dinamikára általánosítottunk) sztatika esetén, homogén rendszerekre a III. fejezetben részletesen ismertettük. Az alábbiakban, mielőtt a random Ising-modell és Ising-spin üveg dinamikájának leírását megkezdénénk, megmutatjuk, hogyan alkalmazható az eredeti Migdal-módszer az (V.51) és (V.52) valószínűség eloszlásokkal definiált inhomogén modellek sztatikájának leírására. (Az RCSM-nek inhomogén rendszerekre történő alkalmazása, és ennek általános tárgyalása a 16. hivatkozásban található.)

Homogén esetben a Migdal-féle rekurziós egyenletek az F függvényre a (II.10) összefüggést jelentették. Jelen esetben az F függvények különbözőek, hiszen mindegyik másik K_i -től függ. Nyilvánvaló, hogy $d=2$ -re és $b=2$ -re most az

$$F_{2L}(ss', K_{2L}) = \sum_{\sigma_1} F_L(s\sigma_1; K_L^1) F_L(\sigma_1 s'_1 K_L^2) \sum_{\sigma_2} F_L(s\sigma_2; K_L^3) F_L(\sigma_2 s'; K_L^4) \quad (\text{V.53})$$

egyenlet áll fenn. (V.53)-ban feltüntettük a csatolási állandók (valószínűségi változók) aktuális értékét. Az (V.53) egyenletet megoldva

$$K_{2L} = \frac{1}{2} \ln \left[\frac{\cosh \{K_1(L) + K_2(L)\} \cosh \{K_3(L) - K_4(L)\}}{\cosh \{K_1(L) - K_2(L)\} \cosh \{K_3(L) - K_4(L)\}} \right] \quad (\text{V.54})$$

adódik. Általános dimenzióban és általános b skálafaktor esetén (V.54) helyett a

$$K_{bL} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{b^d-1} \ln \left[\frac{\prod_{i=1}^b \cosh K_i^1(L) + \prod_{i=1}^b \sinh K_i^1(L)}{\prod_{i=1}^b \cosh K_i^1(L) - \prod_{i=1}^b \sinh K_i^1(L)} \right] \quad (\text{V.55})$$

összefüggés adódik. (Könnyen belátható, hogy (V.55) $d=2$ és $b=2$ esetén az (V.54) alakban írható.) Annak érdekében, hogy az (V.51)-ben és (V.52)-ben szereplő p -re és K^0 -ra rekurziós egyenletet kapjunk, meg kell határoznunk K_{bL} és $K_i^1(L)$ valószínűség eloszlásának momentumait. Mint már említettük, jelen dolgozatban a rekurziós egyenleteket abból a feltételből határozzuk meg, hogy a valószínűség eloszlások az iteráció előtt és az iteráció után is „dupla delta függvény” alakúak legyenek. Ehhez elegendő kiszámítanunk $\langle K_{bL} \rangle$ -et és $\langle K_{bL}^2 \rangle$ -et, ahol

$$\langle K^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dK P(K) K^n. \quad (\text{V.56})$$

Vizsgáljuk először az (V.51) valószínűségeloszlást. Feltételezve, hogy

$$P_{bL}(K) = p_{bL} \delta(K_L - K_L^0) + (1 - p_{bL}) \delta(K_L) \quad (\text{V.57})$$

(V.55) segítségével a szükséges átlagértékek könnyen kiszámíthatók és végezetül az alábbi rekurziós egyenleteket kapjuk:

$$p_{bL} K_{bL}^0 = \frac{b^d-1}{2} p_L^b \ln \left[\frac{1 + \tanh^b K_L^0}{1 - \tanh^b K_L^0} \right], \quad (\text{V.58})$$

$$p_{bL} (K_{bL}^0)^2 = \frac{b^d-1}{4} p_L^b [1 + (b^d-1) p_L^b] \ln^2 \left[\frac{1 + \tanh^b K_L^0}{1 - \tanh^b K_L^0} \right]. \quad (\text{V.59})$$

Természetesen a homogén esetben ($p=1$) visszkapjuk a (II.14) egyenletet. Könnyen belátható, hogy $p^*=1$ egyben a (V.58) és (V.59) rekurziós egyenletek egyetlen fizikailag értelmes fix pont megoldása. (A $p^*=0$ kölcsönhatás nélküli spin rendszert ír le, ami (V.51)-ből látszik.) Azt látjuk tehát, hogy a Migdal-közelítésben az inhomogenitás bevezetése nem változtatja meg a homogén Ising-modellre kapott kritikus viselkedést.

Hasonlóan végezhető el a számolás állandó (homogén) mágneses tér esetében is. Az eredmény ismét a homogén Ising-modellre kapott eredménnyel egyezik [49].

Ezek után vizsgáljuk meg a (V.52) valószínűség eloszlást. Az (V.55) egyenlet nyilvánvalóan most is érvényes. Eltérést a fenti esettől akkor kapunk, ha (V.52) segítségével kiszámítjuk a megfelelő átlagértékeket. A számolás most is viszonylag könnyen elvégezhető és (V.58), (V.59) helyett a

$$(2p_{bL} - 1) K_{bL}^0 = \frac{b^{d-1}}{2} (2p_L - 1)^b \ln \left[\frac{1 + \tanh^b K_L^0}{1 - \tanh^b K_L^0} \right] \quad (V.60)$$

$$(K_{bL}^0)^2 = \frac{b^{d-1}}{4} [1 + (b^{d-1} - 1) (2p_L - 1)^{2b}] \ln^2 \left[\frac{1 + \tanh^b K_L^0}{1 - \tanh^b K_L^0} \right] \quad (V.61)$$

rekurziós egyenletek adódnak. $p^*=1$ ismét megoldása a fenti egyenleteknek és természetesen megint a homogén Ising-modellre kapott (II.14) eredményt kapjuk.

A másik, nem triviális, spin üveg fix pont $p^* = \frac{1}{2}$ értékének felel meg. Ekkor a K -ra vonatkozó fix pont egyenlet, némi átalakítás után

$$\tanh \left[K^* b^{-\frac{d-1}{2}} \right] = \tanh^b K^*. \quad (V.62)$$

Homogén külső mágneses tér esetében, ami

$$P(h_L) = \delta(h_L - h_L^0) \quad (V.63)$$

valószínűség eloszlásnak felel meg, h_L^0 -ra az alábbi rekurziós egyenletet kapjuk:

$$h_{bL}^0 = b^{d-1} h_L^0 \left[1 + \frac{2}{1 - \tanh^{2b} K_L^0} \sum_{k=1}^{b-1} (2p_L - 1)^k \tanh^k K_L^0 \{1 - (\tanh^2 K_L^0)^{b-k+1}\} \right]. \quad (V.64)$$

Ebből $p^*=1$ esetén (és $K_L^0 = K^*$)

$$h_{bL}^0 = b^{d-1} h_L^0. \quad (V.65)$$

Ezek után rátérhetünk a dinamika tárgyalására.

Ismét az (V.1) Master-egyenletből indulunk ki és a korábban használt lineáris válasz elméletet alkalmazzuk. Követve az V/a fejezetben elmondottakat, megkövetelve a Master-egyenlet alakjának invarianciáját a renormalizációs transzformációval szemben, végülis a τ_{bL} időskála faktorra $\tau_{bL} = f(\tau_L, h_L, K_L)$ összefüggést kapunk, melyből τ_L, h_L, K_L valószínűség eloszlásának ismeretében τ_{bL} valószínűség eloszlása kiszámítható. K_L valószínűség eloszlását (V.51) és (V.52) adja meg. h_L valószínűség eloszlását (V.63)-ban definiáltuk, míg τ_L eloszlását

$$P(\tau_L) = \delta(\tau_L - \tau_L^0) \quad (V.66)$$

alakban vesszük fel. Az egyes iterációs lépések után megköveteljük, hogy h_L és τ_L valószínűség eloszlása továbbra is „egy delta függvény” alakú, míg K_L valószínűség eloszlása „dupla delta függvény” alakú legyen. Ezen egyszerűsítések után a random Ising-modell esetében, $d=2$ -re a τ_L^0 -re vonatkozó rekurziós egyenlet éppen (V.28) alakú, ahol K^* helyett most $(K^0)^*$ szerepel. $(K^0)^*$ a sztatikus rekurziós egyenletek $p^*=1$ -hez tartozó fix pont értéke, vagyis a homogén Ising-modell K^* értékével egyezik meg. Így a $d=2$ random Ising-modell esetén, végül is z -re, a dinamikus kritikus exponensre az (V.32) eredmény adódik.

A három dimenziós Ising-spin üveg esetén τ_L^0 -re a következő rekurziós egyenletet kapjuk [66]:

$$\tau_{bL}^0 = \tau_L^0 b^2 \left[\frac{1 - \tanh^{2b}(K^c)^*}{1 - \tanh(K^0)^*} \right]^b \quad (\text{V.67})$$

Ising-spin üveg esetén $(K^0)^*$ fix pontja három dimenzióban, $p^*=\frac{1}{2}$ -re, (II.14) és (V.60) összehasonlításából láthatóan, éppen a két dimenziós homogén Ising-modell K^* fix pontjával esik egybe (lásd alább), vagyis $(K^0)^* = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{2}-1)$, ami a két dimenziós Ising-modell egzakt Onsager-féle kritikus hőmérséklete [6]. Az, hogy a három dimenziós Ising-spin üveg kritikus hőmérséklete megegyezik a két dimenziós homogén Ising-modell kritikus hőmérsékletével, az általunk alkalmazott közelítések következménye. Ugyanakkor nagyon csábító azt mondani, fentiek alapján, hogy Ising-spin üvegre $d=3$ ugyanaz, mint homogén Ising-modellre $d=2$, ami azt sugallhatja, hogy az Ising-spin üveg alsó kritikus dimenziószáma $d=2$, (hiszen a homogén Ising-modellé $d=1$) egyezésben más eredményekkel [119, 120]. Ha összehasonlítjuk (V.67)-et a homogén rendszer rekurziós egyenletével, (V.28)-cal, akkor azt látjuk, hogy (V.67)-ben nem szerepel a d -nak megfelelő sztatikus mágneses exponens. Ez annak a következménye, hogy spin üveg esetén a mágneses tér nem a szokásos rendparaméterhez (mágnesezettséghez) tartozó konjugált mennyiség, mivel a mágnesezettség nem a rendparaméter [109]. Behelyettesítve $(K^0)^*$ értékét (V.67)-be, a három dimenziós Ising-spin üveg dinamikus exponensére

$$z=2,182 \quad (\text{V.68})$$

adódik.

Korábban említettük, hogy amennyiben a teljes valószínűség eloszlással dolgozunk és nem csak annak „dupla delta függvény” alakjával, akkor a Migdal-módszer hatására a két dimenziós Ising-spin üveg nem rendeződik, vagyis $(K^0)^*$ -nak nincs nemtriviális fix pontja [72]. Ugyanakkor azt állítottuk, hogy a „dupla delta függvény” alak három dimenzióban nem jelent túl nagy hibát. Ennek az állításnak az alátámasztására a következő számolást végeztük el. Southern és Young numerikusan megoldották a Migdal-egyenleteket három dimenziós köbös rácson vett Ising-spin üveg esetében úgy, hogy „dupla delta függvény” eloszlással indultak, de később, az iteráció során megtartották a teljes valószínűség eloszlást [74] (és nemcsak annak két legalacsonyabb momentumát). A számolást $b=2$ -re végezték és $(K^0)^*=0,9$ -et kaptak. Ha ezt az értéket (V.67)-be behelyettesítjük, akkor $b=2$ esetén $z=2,64$ adódik. Ha megköveteljük a „dupla delta függvény” alakot minden iterációs lépés után, akkor az Ising-spin üveg $(K^0)^*$ fix pontjára tetszőleges dimenzió-

ban (V.62) adódik ($d=3$ és $b \rightarrow 1$ esetén ebből kapjuk a $(K^0)^* = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{2}-1)$ eredményt). Ha (V.62)-t $b=2$ -re megoldjuk és az így kapott értéket (V.67)-be írjuk, a $z=2,38$ eredményt kapjuk, mely 25%-nál kevesebbet tér el a fenti eredménytől ($z=2,64$ -től).

Annak, hogy vizsgálatainkat „egy delta függvény”, illetve „dupla delta függvény” alakú valószínűség eloszlásokkal végeztük, pusztán gyakorlati oka volt, nevezetesen így a számolásokat analitikusan is el tudtuk végezni. A fenti összehasonlítás alapján azonban azt mondhatjuk, hogy ezek a közelítések három dimenzióban valószínűleg nem lényegiek.

Spin üvegre kapott eredményeink kvalitatíve összhangban vannak *Salamon és Herman* mérési eredményeivel [121].

Mint már említettük, spin üveg esetén a mágnesezettség nem rendparaméter. Mind a mai napig nem teljesen tisztázott kérdés mi a spin üveg rendparamétere. A z exponens általában a rendparaméter kritikus lelassulására használt szimbólum és kifejezi a rendszer leglassúbb módusának viselkedését a kritikus pont közelében. Az általunk meghatározott z érték, (V.68) tehát nem biztos, hogy valóban a rendszer leglassúbb módusára jellemző. További problémaként említhető, hogy inhomogén rendszerek esetén előfordulhat, hogy a lineáris válasz elmélete is érvényét veszíti [123]. Ha ez az általunk vizsgált modellben is így van, akkor annak jelen fejezetben megadott dinamikai leírása is módosításra szorul. (Arra nézve, hogy az általunk vizsgált Ising-spin üvegre a lineáris válasz elmélete ne lenne igaz, nincs általános bizonyítás). Még egyszer alá kívánjuk húzni, hogy jelen fejezetben modell rendszert tanulmányoztunk, melynek dinamikájára egy lehetséges módszert ismertettünk, amely ugyan nem feltétlenül teljesen kielégítő, de mivel lévén az egyedüli analitikus módszer, úgy gondoljuk, hasznos a további vizsgálatok számára.

VI. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban az RCSM-nek sztatikus és dinamikus kritikus jelenségekre történő alkalmazását ismertettük. Ezen belül részletesen egy speciális valós térbeli RCSM-et, a Migdal-módszert vizsgáltuk. Eredményeink az alábbiakban foglalhatók össze.

- a) Az eredetileg sztatikára kidolgozott Migdal-féle rekurziós egyenleteket, folytonos spinmodellek esetén úgy általánosítottuk, hogy szisztematikus közelítő eljárást nyertünk, melynek segítségével elvben tetszőleges pontosság érhető el. Módszerünkkel a Migdal-megoldás számos hiányossága kiküszöbölhető. A kapott rekurziós egyenletek fix pont megoldása, két dimenzióban, a térben folytonos spinrendszer egyensúlyi helyzetét megadó (alkalmas peremfeltételek mellett) Laplace egyenletből is származtathatók. Rekurziós egyenleteinkről kimutatható, hogy speciális rácsmodellekre egzaktak. Az eljárás a két dimenziós harmonikus rotátor modell esetén visszaadja az ismert kvalitatív eredményeket, míg az $O(n)$ szimmetrikus általánosított Heisenberg-modellre másodrendben 3%-nál pontosabb számértékeket ad.
- b) Migdal eredeti közelítéseit kritikus dinamika vizsgálatára általánosítottuk. Megmutattuk, hogy dinamika esetén a Migdal-módszer közelítéseinek sokkal messzebbmenő konzekvenciái vannak, mint sztatikában, és ezért a helyes alkalmazás érdekében rendkívüli gondossággal kell eljárni. A tanulmányozott diszkrét

spinrendszerek valószínűségi eloszlásainak időbeli változását fenomenologikus Master-egyenlettel írtuk le és a renormálási csoport által generált transzformációtól azt követeltük meg, hogy a Master-egyenlet alakját változatlanul hagyja. Így kaptunk rekurziós egyenleteket az atomi relaxációs időkre (időskála faktorokra). Eljárásunkat részletesen a Glauber—Ising-modell példáján mutattuk be. A dinamikus kritikus exponensekre a magashőmérsékleti sorfejtések eredményeivel közel egyezőket kaptunk. A mágnesezettség relaxációja energiaszerű és mágneses perturbáció esetén, a várakozásnak megfelelően, egyezőnek adódott. A módszert alkalmaztuk az Ising-modell általánosításának tekinthető Potts-modellre, ahol is elsőként tudtunk analitikus számolást végezni a dinamikus kritikus exponensekre.

- c) Megmutattuk, hogyan alkalmazható a Migdal-módszer inhomogén rendszerek kritikus viselkedésének leírására. Ilyenkor a rekurziós egyenleteket a rendszert jellemző valószínűségi változók (csatolási állandók) eloszlási függvényének momentumaira alkottuk meg. Ismertettük a random Ising-modell és Ising-spin-üveg kritikus sztatikájának leírását, majd a b) pontban említett általánosítással megvizsgáltuk a fenti rendszerek egy lehetséges dinamikai leírását, mely egyben az első és mind ez ideig az egyetlen analitikus számolás ilyen rendszerekre.

A bevezetőben említettük, hogy a Migdal-módszer az egyetlen olyan valós térbeli RCSM, mely különösebb nehézség nélkül alkalmazható folytonos szimmetriájú spinrendszerek vizsgálatára. (A Niemeijer és van Leeuwen-módszerének ilyen modellekre történő alkalmazásával kapcsolatban lásd a 122. hivatkozást.) Folytonos szimmetriájú klasszikus spinrendszerek dinamikáját általában a Langevin-egyenletből kiindulva impulzus térbeli RCSM-rel vizsgáltak [34]. Természetes további kutatási témaként jelölhető tehát meg a disszertációban leírt módszernek folytonos szimmetriájú spinmodellek ($O(n)$ szimmetrikus vektor modellek) kritikus dinamikájának tárgyalására történő alkalmazása.

Mivel ilyenkor a Migdal-módszer általunk kidolgozott általánosítása sztatika esetén jó eredményeket ad és szisztematikus közelítést jelent, célszerű lenne a IV. fejezetben leírt módszert dinamikára alkalmazni.

További kutatási témaként lehet megjelölni a kritikus dinamika tárgyalását megmaradási törvények esetén. Az általunk tárgyalt rendszerekben sem a mágnesezettség, sem az energia megmaradását nem követeltük meg. Megmaradási törvények esetén a számítások elbonyolódnak és ez ideig valós térbeli RCSM-rel mindössze az egy dimenziós Glauber—Ising-modell megfelelő változatát (általánosított Kawasaki-modell) sikerült megoldani [123]. Célszerű lenne a disszertációban leírt módszert ilyen rendszerekre alkalmazni.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki *dr. Siklós Tivadarnak*, a KFKI Szilárdtestfizikai Elméleti Osztálya vezetőjének, akinek nagymértékben köszönhető az az alkotói légkör, mely többek között eme disszertáció elkészítését is lehetővé tette.

Nagymértékben hálás vagyok *dr. Zavadowszki Alfrédnek* és *dr. Sólyom Jenőnek*, akik a renormálációs csoport témakörébe bevezettek és kutatói munkám szinte minden szakaszában tanácsaikkal és szakmai tapasztalataikkal segítettek.

Eme disszertációban leírtak tartalmazzák az Elméleti Osztály legtöbb, és az Eötvös Loránd Tudomány Egyetem Elméleti Fizika Tanszéke számos kutatójával folytatott szakmai beszélgetések során kapott hasznos tanácsokat, ötleteket és észrevételeket, melyekért ezúton mondok mindenkinek köszönetet.

IRODALOM

1. J. D. Van der Waals, Doktori disszertáció, 1873.
2. W. L. Bragg, E. J. Williams, Proc. Roy. Soc. 145, 699, 1934.
3. H. A. Bethe, Proc. Roy. Soc. (London), A150, 552, 1935.
4. R. Peterls, Proc. Camb. Phil. Soc. 32, 471, 1936.
5. L. D. Landau, E. M. Lifsic, Sztatisticeszkaja Fizika; Nauka, Moszkva 1964.
6. L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117, 1944.
7. M. A. Moore, D. Jasnow, M. Wortis, Phys. Rev. Lett. 22, 940, 1969.
8. M. F. Sykes, M. E. Fisher, Physica 28, 919, 1962.
9. J. W. Essam, M. E. Fisher, J. Chem. Phys. 38, 802, 1963.
10. C. Domb, Adv. Phys. 9, 140, 1960.
11. J. P. Straley, M. E. Fisher, J. Phys. A6, 1310, 1973.
12. I. G. Enting, J. Phys. A8, L35, 1975.
13. Z. Rácz, M. F. Collins, Phys. Rev. B73, 3074, 1976.
14. L. P. Kadanoff, W. Götzke, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes, J. Kane, Rev. Mod. Phys. 39, 395, 1967.
15. H. E. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena; Clarendon Press, Oxford, 1971.
16. S-K. Ma, Modern theory of Critical Phenomena, W. A. Benjamin, Inc., London—Amsterdam—Don Mills, Ontario—Sydney—Tokyo, 1976.
17. L. P. Kadanoff, Physics 2, 263, 1966.
18. K. G. Wilson, J. Kogut, Phys. Report C12, 75, 1974.
19. K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773, 1975.
20. M. Gell-Mann, F. E. Low, Phys. Rev. 95, 1300, 1954.
21. N. N. Bogoljubov, D. V. Sirkov, Vegyenyije v tyeoriju kvantovannik polej. Goszizd, Moszkva, 1957.
22. M. Fowler, A. Zawadowski, Solid State Comm. 9, 471, 1971.
23. A. A. Abrikosov, A. A. Migdal, J. Low Temp. Phys. 3, 519, 1970.
24. C. Di Castro, G. Jona-Lasinic, Phys. Lett. 29A, 322, 1969.
25. E. Brezin, J. C. Le Guillou, J. Zinn-Justin, Phase Transitions and Critical Phenomena. Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco 1976.
26. E. Brezin, J. Zinn-Justin, Phys. Rev. B14, 3116, 1976.
27. A. M. Poljakov, Phys. Lett. 59B, 82, 1975.
28. N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. 17, 1133, 1966.
29. S-K. Ma, Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco, 1976.
30. C. G. Callan, Phys. Rev. D5, 3202, 1972.
31. K. Symanzik, Commun. Math. Phys. 23, 49, 1971.
32. C. Di Castro, G. Jona-Lasinio, Phase Transitions and Critical phenomena, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco 1976.
33. G. Forgács, J. Sólyom, A. Zawadowski, Phase Transitions In Condensed Matter, szerk.: M. Mátyás, Csehszlovák Tudományos Akadémia, Prága, 1978.
34. B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, Rev. Mod. Phys. 49, 435, 1977.
35. A. Aharony, Phase Transitions and Critical phenomena, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco, 1976.
36. M. E. Fisher, A. Aharony, Phys. Rev. B10, 2818, 1974.
37. A. Aharony, Phys. Rev. B8, 3342, 3349, 3358, 3363, B9, 3649 (E), 1973.
38. A. D. Bruce, A. Aharony, Phys. Rev. B11, 478, 1975.
39. G. Forgács, A. Zawadowski, Acta Phys. Hung. 42, 353, 1977.
40. G. Forgács, Lett. Nuovo Cim. 10, 845, 1976.
41. D. J. Wallace, Phase Transitions and Critical phenomena, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco, 1976.
42. G. Forgács, Acta Phys. Hung. 42, 261, 1977.
43. Th. Niemeijer, J. M. J. van Leeuwen, Phase Transitions and Critical Phenomena, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco, 1976.
44. Y. Achiam, J. M. Kosterlitz, Phys. Rev. Lett. 41, 128, 1978.
45. G. F. Mazenko, M. H. Nolan, O. T. Valls, Phys. Rev. B22, 1263, 1980.
46. G. F. Mazenko, M. J. Nolan, O. T. Valls, Phys. Rev. B22, 1275, 1980.
47. L. P. Kadanoff, Phys. Rev. Lett. 34, 1005, 1975.

48. L. P. Kadanoff, B. Houghton, *Phys. Rev. B11*, 377, 1975.
49. A. A. Migdal, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 69, 1457, 1975.
50. A. A. Migdal, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 69, 810, 1975.
51. A. N. Berker, S. Ostlund, F. A. Putnam, *Phys. Rev. B17*, 3650, 1978.
52. C. Jayaprakash, E. K. Riedel, M. Wortis, *Phys. Rev. B18*, 2244, 1978.
53. G. Forgács, A. Zawadowski, *Z. Phys. B46*, 347, 1982.
54. L. P. Kadanoff, *Ann. Phys.* 100, 355, 1976.
55. G. Martinelli, G. Parisi, *Nuclear Physics B180 (FS2)*, 201, 1981.
56. G. Forgács, A. Zawadowski, *Z. Phys. B46*, 359, 1982.
57. L. van Hove, *Phys. Rev.* 95, 249, 1374, 1954.
58. R. J. Glauber, *J. Math. Phys. (N. Y.)* 4, 294, 1963.
59. R. A. Ferrell, N. Menyhárd, H. Schmidt, F. Schwabl, P. Szépfalusy, *Phys. Rev. Lett.* 18, 891, 1967.
60. B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, *Phys. Rev. Lett.* 19, 700, 1969.
61. B. I. Halperin, P. C. Hohenberg, S.-K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* 29, 1548, 1972.
62. I. Kondor, P. Szépfalusy, *Ann. Phys.* 82, 1, 1974.
63. S. T. Chui, G. Forgács, H. L. Frisch, *Phys. Rev. B20*, 243, 1979.
64. M. Suzuki, K. Sogo, I. Matsuba, H. Ikeda, T. Chikama, *Prog. Theor. Phys.* 61, 864, 1979.
65. G. Forgács, S. T. Chui, H. L. Frisch, *Phys. Rev. B22*, 415, 1980.
66. G. Forgács, S. T. Chui, H. L. Frisch, *Phys. Lett.* 75A, 237, 1980.
67. F. Wegner, *Phase Translations and Critical Phenomena*, Volume 6, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press, London, New York, San Francisco 1976.
68. E. Riedel, F. Wegner, *Z. Phys.* 225, 195, 1969.
69. V. Berezinskij, *Disszertáció*, Moszkva, 1972.
70. C. N. Yang, *Phys. Rev.* 85, 808, 1952.
71. D. R. Nelson, M. E. Fischer, *Ann. Phys. (N. Y.)* 91, 226, 1975.
72. S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. B15*, 1533, 1977.
73. C. Jayaprakash, J. Chalupa, M. Wortis, *Phys. Rev. B15*, 1495, 1977.
74. B. W. Southern, A. P. Young, *J. Phys. C10*, 2176, 1977.
75. J. V. Jose, L. P. Kadanoff, S. Kirkpatrick, D. R. Nelson, *Phys. Rev. B16*, 1217, 1977.
76. V. J. Emery, R. H. Swendsen, *Phys. Lett.* A64, 325, 1977.
77. S. Ostlund, A. N. Berker, *Phys. Rev. Lett.* 42, 843, 1979.
78. M. Nauenberg, D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* 44, 837, 1980.
79. A. N. Berker, S. Ostlund, *J. Phys. C12*, 4961, 1979.
80. A. N. Berker, L. P. Kadanoff, *J. Phys. A13*, L259, 1980.
81. E. Domany, E. K. Riedel, *Phys. Rev. B19*, 5817, 1979.
82. Y. Gefen, B. B. Mandelbrot, A. Aharony, *Phys. Rev. Lett.* 45, 855, 1980.
83. J. Villian, *J. Phys. (Paris)* 36, 581, 1975.
84. A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North Holland, Amsterdam, 1958.
85. K. Kawasaki, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Volume 2, szerk.: C. Domb, M. S. Green, Academic Press London, New York, 1972.
86. S. Chandrasekhar, *Rev. Mod. Phys.* 15, 1, 1943.
87. H. Yahota, M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* 27, 1421, 1969.
88. Y. Achiam, *J. Phys. A13*, 1355, 1980.
89. H. C. Bolton, C. H. J. Johnson, *Phys. Rev. B13*, 3025, 1976.
90. J. Tobachnik, S. Sarker, R. Cordery, *Phys. Rev. Lett.* 46, 1417, 1981.
91. R. B. Potts, *Proc. Phil. Soc.* 48, 106, 1952.
92. S. Alexander, *Phys. Lett.* A54, 353, 1975.
93. E. Domany, E. K. Riedel, *Phys. Rev. Lett.* 60, 561, 1978.
94. M. Bretz, T. C. Dash, *Phys. Rev. Lett.* 27, 647, 1971.
95. D. M. Butler, G. B. Huff, R. T. Tóth, G. A. Stewart, *Phys. Rev. Lett.* 35, 1718, 1976.
96. M. Bretz, *Phys. Rev. Lett.* 38, 601, 1977.
97. F. A. Putnam, T. Fort, R. B. Griffiths, *J. Phys. Chem.* 81, 2171, 1977.
98. P. M. Horn, R. J. Birgeneau, P. Heiney, E. M. Hammonds, *Phys. Rev. Lett.* 41, 961, 1978.
99. R. J. Baxter, *J. Phys. C6*, L 445, 1973.
100. M. J. Stephen, *Phys. Lett.* A56, 149, 1976.
101. C. Dasgupta, *Phys. Rev. B15*, 3460, 1977.
102. B. Nienhuis, A. N. Berker, E. K. Riedel, M. Schick, *Phys. Rev. Lett.* 43, 737, 1979.
103. M. P. M. den Nijs, *J. Phys. A12*, 1857, 1979.
104. R. J. Baxter, *Ann. Phys. (N. Y.)* 70, 193, 1972.

105. *Y. Achiam*, Phys. Rev. *B19*, 376, 1979.
106. *J. M. Ziman*: Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972.
107. *M. Kac*: Trondheim Theoretical Physics Seminar, Nordita Publ. No. 286, 1968.
108. *T. F. Lin*, J. Math. Phys. *11*, 1584, 1970.
109. *S. F. Edwards*, *P. W. Anderson*, J. Phys. *F5*, 965, 1975.
110. *G. Grinstein*, *A. H. Luther*, Phys. Rev. *B13*, 1329, 1976.
111. *S. F. Edwards*, Proceedings of the Third International Conference on Amorphous Materials, 1970; szerk.: *R. W. Douglass*, *B. Ellis*, Wiley, New York, 1972.
112. *S. F. Edwards*, Polymer Networks, szerk.: *A. J. Chomppff*, *S. Newman*, Plenum, New York, 1971.
113. *V. J. Emery*, Phys. Rev. *B11*, 239, 1975.
114. *D. Sherrington*, *S. Kirkpatrick*, Phys. Rev. Lett. *35*, 1972, 1975.
115. *S. Kirkpatrick*, *D. Sherrington*, Phys. Rev. *B17*, 4384, 1978.
116. *G. Parisi*, Phys. Lett. *A73*, 203, 1979.
117. *G. Parisi*, Phys. Rev. Lett. *43*, 1754, 1979.
118. *A. B. Harris*, J. Phys. *C7*, 1671, 1974.
119. *P. C. Anderson*, *C. M. Pond*, Phys. Rev. Lett. *40*, 903, 1978.
120. *A. P. Young*, *R. B. Stinchcombe*, J. Phys. *C9*, 4419, 1976.
121. *M. B. Salamon*, *R. M. Herman*, Phys. Rev. Lett. *41*, 1506, 1978.
122. *D. M. Lublin*, Phys. Rev. Lett. *34*, 568, 1975.
123. *G. Parisi*, J. Phys. *A13*, 1887, 1980.

RELATIVISZTIKUS NEHÉZ-ION ÜTKÖZÉSEK HIDRODINAMIKAI LEÍRÁSA*

CSERNAI LÁSZLÓ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	232
2. A hidrodinamikai modell	235
2.1 A reakciómechanizmus	235
2.2 A hidrodinamikai leírás története	236
2.3 A hidrodinamikai és a kaszkád modell	236
2.4 A relativisztikus leírás szükségessége	237
2.5 A hidrodinamikai modell egyenletei	237
2.5.1 Relativisztikus hidrodinamika	237
2.5.2 Nemrelativisztikus határeset	238
2.6 A lokális egyensúly feltevése	239
2.6.1 Az átlagos szabad úthossz	239
2.6.2 Az egyensúly kialakulása	240
3. A maganyag állapotegyenlete és vizsgálatának korábbi módszerei	241
3.1 Az egyensúlyi állapotegyenlet	242
3.2 A maganyag kinetikus együtthatói	244
3.3 Fázisátalakulások	245
3.4 Az állapotegyenlet vizsgálata asztrofizikai módszerekkel	246
3.4.1 Relativisztikus csillagvéggállapotok	246
3.4.3 Univerzummodellek	247
4. A párolgási modell	247
4.1 A nukleon hatáskeresztmetszet	248
4.1.1 Szabad és összes nukleon hatáskeresztmetszet	248
4.2 Kémiai egyensúly a párolgásban	250
4.2.1 Kémiai egyensúly könnyű magok között	250
4.2.2 A kémiai egyensúly beillesztése a párolgási modellbe	252
5. A lökéshullámok tanulmányozása	255
5.1 Relativisztikus Rankine—Hugoniot-egyenletek	255
5.1.1 A lökéshullám belső szerkezete	255
5.1.2 A Rankine—Hugoniot-közelítés érvényessége	256
5.2 Részecskék kiszóródása a forró tartományból	259
6. Részletes hidrodinamikai számítások	261
6.1 A félrecsúszás	262
6.2 A félrecsúszás észlelhető jelei	263
6.2.1 Szabad és össznukleon hatáskeresztmetszetek	263
6.2.2 Kis mag hatáskeresztmetszetek	267
6.3 Korrelációs vizsgálatok	268
6.3.1 Két proton korreláció	268
6.3.2 Korreláció lassú nehéz és gyors könnyű részecskék között	271
7. Fázisátalakulások hatásának vizsgálata	273
7.1 Fázisátalakulások a hidrodinamikában	273
7.1.1 Gyors fázisátalakulás	273
7.1.2 Lassú fázisátalakulás	274

* Kandidátusi értekezés. Érkezett 1982, nov. 11.

7.2 A fázisátalakulás jelei a hatáskeresztmetszetben	277
7.2.1 A fázisátalakulás figyelembevétele	277
7.2.2 A háromszor differenciális hatáskeresztmetszetben tapasztalható eltérések	277
8. A hidrodinamikai modell továbbfejlesztése	279
8.1 A három folyadék hidrodinamika	280
8.2 A forrástagok	281
9. Összefoglalás	282
9.1 A relativisztikus nehéz-ion reakciók elméletéről	282
9.2 A hidrodinamikai modell helyzete	282
9.3 A disszertációbeli munkákról	283
9.4 Az értekezés főbb tudományos eredményeinek összefoglalása	283
10. Köszönetnyilvánítás	285
11. Felhasznált irodalom	285

1. BEVEZETÉS

A nagy tömegű atommagok laboratóriumi gyorsítása relativisztikus energiákra (0,2—4 GeV/nukleon) lehetőséget teremtett arra, hogy a sűrű és forró maganyagról — amely az ilyen reakciókban kialakul — ellenőrizhető információkat nyerjünk. Az ütközési folyamat két atommag között azonban igen összetett jelenség — mint ahogy ez az első vizsgálatokból kiderült —, és így pontos kvantitatív következtetések levonása összehangolt és rendszeres kísérleti és elméleti vizsgálatoktól várható. (Részletes ismertetést a (Gy79, 80, 81, Sc81) összefoglaló cikkekben találhatunk.) A korai, egyszerű modellek után két részletes elméleti modell család fejlődött ki: a nukleon—nukleon kaszkád és a hidrodinamikai modell. Ezen két modell merőben különböző alapfeltételekből indult ki, de a korábbi kísérleteket mindkét modell viszonylag jól reprodukálta. Az 1980-as év során három olyan kísérletet végeztek el, amelyek egyértelműen megmutatták, hogy vannak jelenségek amelyek csak a hidrodinamikai modellekben értelmezhetők (Ta80ab, St80a, Me80). Ezek a jelenségek a közel centrális ütközésekben lépnek fel, ahol a sűrű és forró maganyag kialakulása várható. Természeténél fogva a hidrodinamikai modell a kollektív folyamatok leírására alkalmas, míg az ugyancsak fellépő egyrészecske effektusokat (pl.: prompt nukleon emisszió, kvázi rugalmas nukleon—nukleon kiszórás) nem tartalmazza.

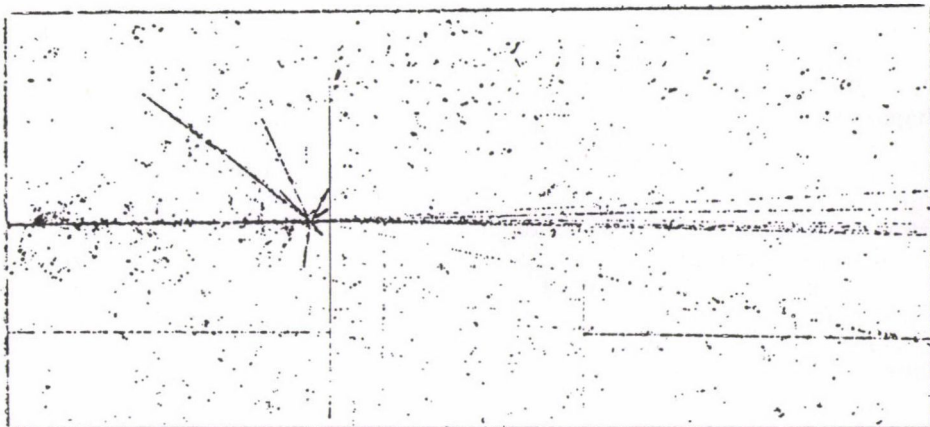
Igen magas energiákon (~ 1 GeV/n.) a hagyományos (egy folyadék) hidrodinamikai leírás javításra szorul és egy minőségileg új, több folyadék hidrodinamikai modell válik szükségessé.

Az értekezésben leírt kutatások célja, hogy egy konzisztens és részletes elméleti modellt fejlesszen ki, amely elméleti kapcsolatot teremt a maganyag tulajdonságai és a kísérletileg mérhető mennyiségek között, annak érdekében, hogy az eddig nem vizsgálható sűrűség és energiatartományban is megismerjük a maganyag tulajdonságait.

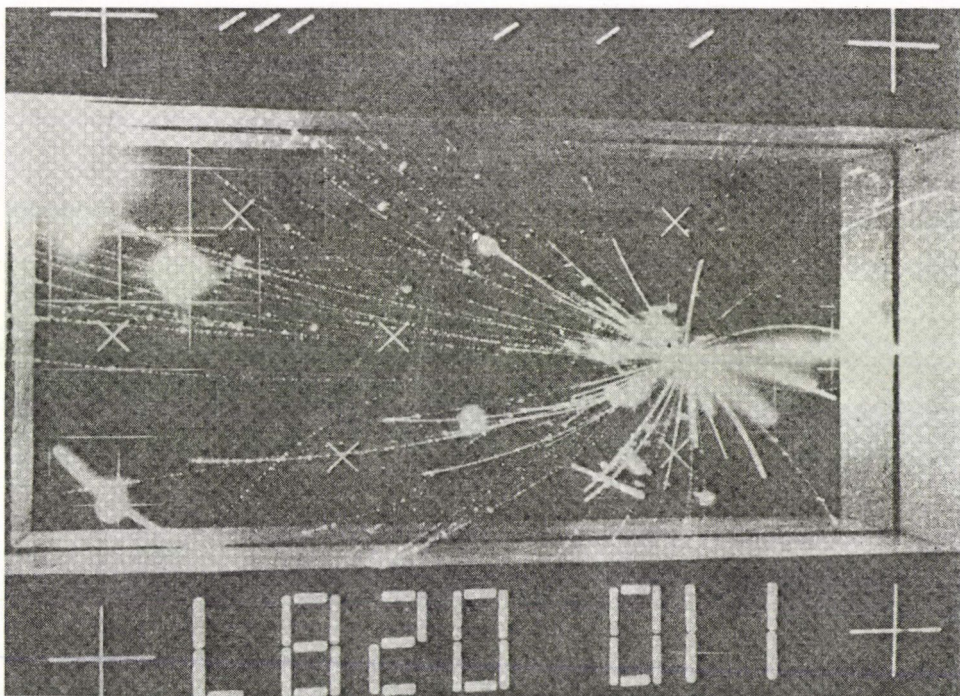
Mivel a részecskefizikai elméletek szerint az ezekben az ütközésekben létrejövő körülmények között az anyag maganyagból esetleg kvarkanyagká is átalakulhat, a fenti feladat egyúttal azt is jelenti, hogy az anyag általános tulajdonságait vizsgáljuk nagy sűrűségek és hőmérsékletek esetén.

A fenti adatokból fakadóan az anyag egyensúlyi, valamint transzport tulajdonságait is meg kell ismernünk, mivel ezek egyaránt befolyásolják az ütközési folyamat dinamikáját. Míg az egyensúlyi tulajdonságokat (állapotegyenlet) már korábban is részletesen vizsgálták elméletileg, főként asztrofizikai vonatkozásai miatt, a transz-

B - 11



1. ábra. Emulzió felvétel egy 1,8 GeV/nukleon energiájú Ar atommag periferiális ütközéséről. Nagyenergiájú, előre szórt, a nyaláb magból eredő részecskék és alacsonyabb energiájú, céltárgymag fragmentek nyoma figyelhető meg. A nyaláb részecskék főleg a felvétel alsó felén láthatók

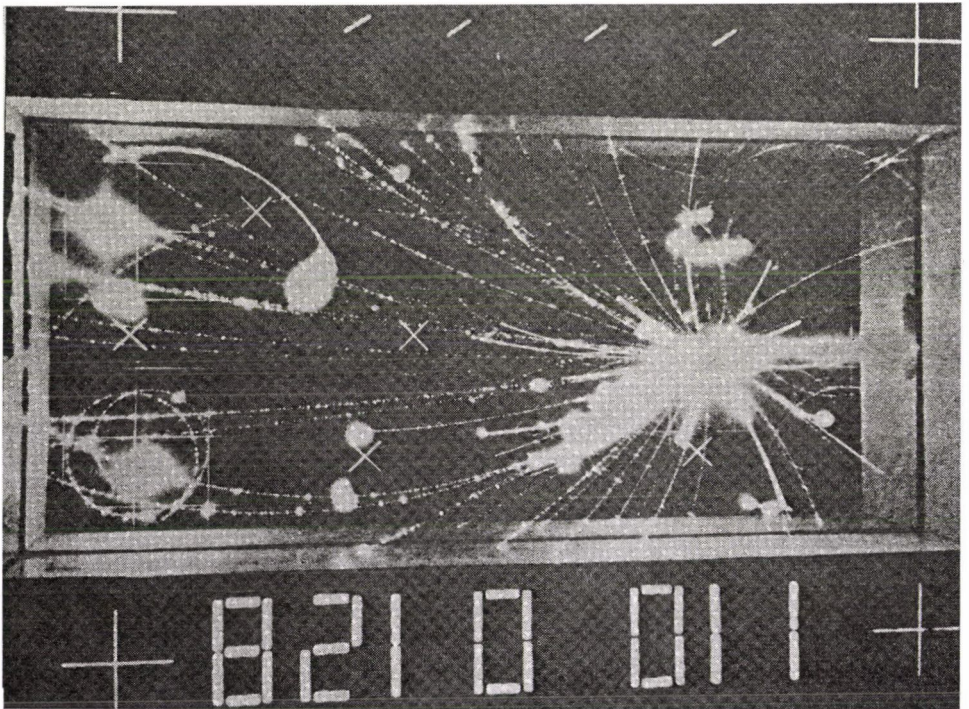


2. ábra. Streamer-kamra felvétel egy 1,8 GeV/A energiájú Ar nyalábmag Pb céltárgymagon történt ütközéséről. A nagyenergiájú részecskék (vékony nyomok) főként a felvétel alsó felén láthatók, a targetból származó fragmentek (vastag nyomok) pedig a felvétel felső felén. Ebből arra következtethetünk, hogy egy viszonylag kicsiny, $b=3-7$ fm ütközési paraméterű reakciót láthatunk

port tulajdonságok egyáltalán nem, vagy csak az egyensúly közelében alacsony gerjesztési energiákon ismertek. Az igen magas energiájú ($>1-2 \text{ GeV/n.}$) ütközésekben mind a termikus, mind a kémiai egyensúlytól igen távol van a rendszer a kezdeti pillanatokban. Így tehát egy olyan hidrodinamikai módszer kifejlesztésére van szükség, amely az adott ütközési energián fellépő legfontosabb folyamatokat magába foglalja.

Közepes energiákon ($0,2-1 \text{ GeV/n.}$) a transzport folyamatok egyensúlyhoz közeli tárgyalása kielégítő elméleti módszert szolgáltat, míg ennél nagyobb energiákon az egyensúly felé vezető folyamatok explicit leírása kívánatos. Az ezeket a következményeket kielégítő elméleti módszer a viszkozitást és hővezetést is leíró több folyadék hidrodinamika.

Az ütközési folyamat teljes egészében történő leírására még ebben a formában sem alkalmas a hagyományos hidrodinamika. Az ütközés végső fázisában, amikor az összenyomott és felforrósodott maganyag kitágul, az anyag fokozatosan olyan ritkává válik, hogy részei között a kölcsönhatás megszűnik és az anyag független részecskék formájában jut el a detektorokig. Az érkekezésben leírt kutatásokban ennek a folyamatnak a leírására egy olyan módszert mutatunk be, amely ezt a folyamatot közelítőleg, mint egy hirtelen átmenetet (break-up) és az azt követő párolgást írja le. A párolgási modellt a kísérletekkel való összevetés és a számítási idő



3. ábra. Streamer kamra felvétel egy centrális Ar ($1,8 \text{ GeV/n.}$)+Pb reakcióról. A töltött reakciótermékek multiplicitása kb. 80, főleg közepes energiájú protonok és pionok. A céltárgy és a nyaláb mag járuléka nem különíthető el. A negatív pionok nyoma balra kanyarodik el

mérséklése miatt több különböző változatban is megvizsgáljuk. A kidolgozott módszer legrészletesebb változatában (ez igényel persze a legtöbb számítási időt is) lehetővé teszi alfa részecskékig bezárólag az összes könnyű atommag „háromszor differenciális” hatáskeresztmetszetének meghatározását, míg egyszerűbb formáiban csak a szabad nukleonok, illetve az össz-maganyag eloszlásának kiszámítását teszi lehetővé.

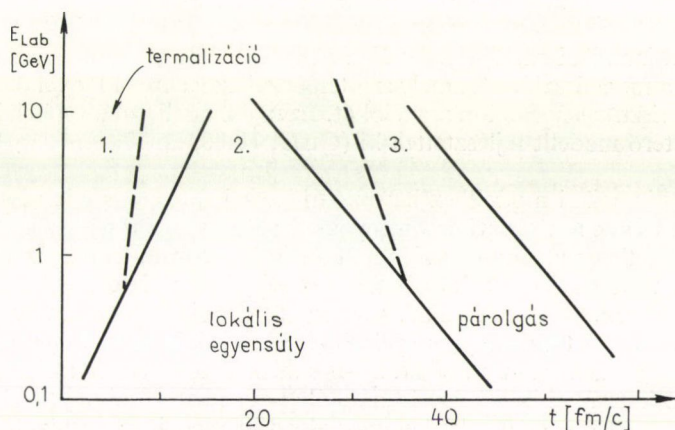
2. A HIDRODINAMIKAI MODELL

2.1 A reakciómechanizmus

Mielőtt belekezdenénk a hidrodinamikai leírás ismertetésébe, röviden bemutatjuk egy centrális vagy kis ütközési paraméterű reakció lefolyásának időbeli felosztását a lokális termodinamikai egyensúly szempontjából (4. ábra).

Amint azt a bevezetésben említettük, a nehéz-ion reakciókban először a lokális egyensúly kialakulása játszódik le (1), majd az ütközési energiától függően egy hosszabb vagy rövidebb ideig a rendszer lokálisan egyensúlyban vagy annak közelében van (2). A végső fázisban (3) a rendszer kiterjed, a szomszédos tartományok közti kölcsönhatások fokozatosan megszűnnek, és a maganyag kis fragmentekre törik fel.

Az egyfolyadék leírás lényegében a (2) szakaszban érvényes. Alacsonyabb energián e mellett az (1) szakasz elhanyagolhatóan rövid. A GeV tartományban azonban, mint az a 4. ábrán látható, a termalizáció már jelentősebb ideig tart, miközben a teljes reakcióidő csökken. Ekkor már a termalizáció folyamatát explicit figyelembe kell venni. Ennek egy módja a 8. fejezetben bemutatásra kerülő több folyadék hidrodinamikai leírás.



4. ábra. Centrális nehéz-ion ütközés reakciómechanizmusa. A termodinamikai egyensúly szempontjából a reakciót három szakaszra oszthatjuk: (1) termalizáció, (2) lokális egyensúly, (3) párolgás. Látható, hogy a nyalábenergia növekedésével a rendszer egyre kevesebb időt tölt a lokális termodinamikai egyensúly közelében. Egy esetleges fázisátalakulás azonban a termalizáció folyamatát jelentősen meggyorsíthatja (Gy77) és így a (2) szakasz meghosszabbodhat (szaggatott vonal)

2.2 A hidrodinamikai leírás története

A hidrodinamikai modell első alkalmazásai a nagy energiájú nehéz ion reakciók leírására a maganyag felsűrűsödésének és lökéshullámok kialakulásának lehetőségét vizsgálták (Sc68, 69, Ch73, Wo74, Sc74, So75, Ba75). Mindezek a munkák általában viszonylag egyszerű modellekre alapozódtak és nagyon egyszerű geometriai esetekre korlátozódtak.

Miután a hidrodinamikai modellek iránti érdeklődés megnőtt, egy nagymérvű fejlődés indult meg az általános számítógépigényes hidrodinamikai modellek terén. Háromdimenziós relativisztikus modellt fejlesztettek ki Los Alamosban a „particle-in-cell” (Am66) reaktorfizikai áramlástani program alapján (Am75, 77, 78, Ha76, Ni79ab, 81, Ka81ab) és egy szintén háromdimenziós programot Frankfurtban, a „flux-corrected-transport” (Bo73) módszer alapján, amely a hosszú hatótávolságú kölcsönhatásokat (Coulomb, Yukawa pot.) is magába foglalta (St79b—80d, Bu81abc, Gr81a, Th81, Cs81a—f). Valamivel kisebb intenzitással történtek még hidrodinamikai vizsgálatok Oak-Ridgeben (Wo77, Ma76, Ta80c), Varsóban (Da79) és Budapesten (Lu78, Cs79abc, 80ab).

1980-ra az előző tapasztalatok és a különböző csoportok kölcsönhatása alapján egy viszonylag egyöntetű kép alakult ki a hidrodinamikai modellről, érvényességi köréről, előnyeiről és hátrányairól. A különböző csoportok által elvégzett számítások hasonló vagy éppen azonos eredményre vezetnek, és ezen eredmények érdekes és észlelhető kollektív hidrodinamikai jelenségeket jósolnak. A hidrodinamikai modellek körében az egyszerűbb modellek sem veszítették el jelentőségüket, mert egyes egzotikus folyamatok tanulmányozására kiváló eszközül szolgálnak.

2.3 A hidrodinamikai és a kaszkád modell

A hidrodinamikai modellen kívül a magon belüli nukleon kaszkád modellek alkotják azt a modelleszaládot, amely szintén azzal az igénnyel lép fel, hogy általában leírja a relativisztikus nehéz ion reakciókat. Ezen a modelleszaládon belül nagy számú egymástól eltérő modellt fejlesztettek ki (Gu79, Ha80, Hü77, Kn79ab, 80, Cu81abc, Ya79).

A hidrodinamikai modellhez hasonlóan ezek is bizonyos feltevéseken alapsznak, melyeket csak a kísérleti eredményekkel való összevetés igazolhat. A kaszkád modellek független nukleon—nukleon ütközések sorozataként írják le a reakciót, és így 3 vagy több nukleon kölcsönhatásokat vagy hosszú hatótávolságú erőket nem vesznek figyelembe. Ez a feltétel általában csak ritka rendszerekre érvényes, és normál, de főként felsűrűsödött maganyagra való érvényessége kétségbe vonható. A nukleon—nukleon ($n-n$) ütközéseket a szabad $n-n$ hatáskeresztmetszettel írják le és a Pauli-elv korlátozó hatását csak a kaszkád modellek egy része veszi figyelembe. Mindezen elvi korlátok mellett a gyakorlatilag megvalósított modellekben további elhanyagolások is vannak (pl.: a szabad úthossz minimumának rögzítése 2—3 fm-re; két korábban már ütközést szenvedett részecske egymással való ütközésének elhanyagolása (Gu79)). Mind az elvi, mind a numerikus okokból történt elhanyagolások oda vezetnek, hogy a kaszkád modellek viszonylag lassú termalizációt mutatnak és kollektív folyamatok nem vagy csak igen enyhe formában lépnek fel. Ezáltal a kaszkád modellek bizonyos kísérleti eredményeket nem reprodukálnak (St81d).

Minden hátrányuk mellett a kaszkád modellek szép sikereket mutattak fel inkluzív hatáskeresztmetszetek reprodukálásában (mivel ezekben geometriai okokból a perifériális ütközések dominálnak) és koincidencia kísérletek értelmezésében az alacsonyabb tömegszámok ($A < 80$) tartományában (Kn81). Így végül is a kaszkád és hidrodinamikai modellek összevetéséről annyit mondhatunk, hogy ezek a modellek a relativisztikus nehéz ion ütközések más más csoportjainak leírására alkalmasak, valamint, hogy egy átmeneti tartományban mindkét modell érvénnyel bír és bizonyos részfolyamatokat megfelelően ír le (Cs81e).

2.4 A relativisztikus leírás szükségessége

A 0,2—2 GeV/n. energiatartományban a kinetikus energia a nukleon nyugalmi tömegéhez képest nem elhanyagolható. Másrészt viszont tömegközépponti rendszerben szimmetrikus ütközés esetén a kinetikus energia a fentiek csak egy negyedét teszi ki, és így a nemrelativisztikus közelítés is elfogadható a fenti energiatartomány alsó részében. Az eddig elvégzett hidrodinamikai számítások jelentős része nemrelativisztikus leírást alkalmaz, főleg azért, mert a modell fizikailag fontos részeit (viszozítás, potenciálok) relativisztikus formában jelenleg nem lehet numerikusan megvalósítani.

A relativisztikus leírást nemcsak a közismert, sebességtől függő relativisztikus korrekciók teszik szükségessé, hanem az is, hogy a felsűrűsödött, forró maganyagban a nyomás és gerjesztési energia már nem hanyagolható el a nyugalmi tömeg mellett. Másrészt a hosszú hatótávolságú potenciálok retardált hatása is komoly relativisztikus változásokat okozhat, ezt azonban máig egyetlen modellben sem vették figyelembe.

2.5 A hidrodinamikai modell egyenletei

Ebben a pontban először relativisztikus, majd nemrelativisztikus formában bemutatjuk a hidrodinamikai modell alapegyenleteit. Ezeket az egyenleteket ugyan többféleképpen is származtathatjuk mikroszkopikus elméletekből (pl. a Boltzmann-transzport elméletből (Hu63) vagy időfüggő Hartree—Fock-elméletből (Wo74)), azonban a hidrodinamikai egyenletek általánosabb érvényűek mint a kiindulási modell. Minden olyan kontinuum dinamikáját leírják ugyanis, amely lokálisan termikus egyensúlyban vagy ahhoz közeli állapotban van. Az ilyen rendszer jellemezhető termodinamikai paraméterekkel és a hidrodinamikai egyenletek lényegében csak az anyag-, impulzus- és energia-megmaradást fejezik ki.

2.5.1 Relativisztikus hidrodinamika. — A relativisztikus hidrodinamika mozgásegyenletei az energia-impulzustenzor négyes divergenciájának eltűnéséből $T^{ik}_{,k} = 0$ származtathatók. (A vessző a relativitáselméletben szokásos módon parciális differenciálást jelöl, $i=0, 1, 2, 3$. A $c=1$ konvenciót alkalmazzuk.) Egy folyadék energiaimpulzus tenzora a következő formában írható fel:

$$T^{ik} = (\varrho + p)u^i u^k + p g^{ik} - \eta' (g^{ik} + u^i u^k) u^r_{,r} - \\ - \eta (u_{r,s} + u_{s,r}) (g^{ir} + u^i u^r) (g^{ks} + u^k u^s) + q^i u^k + q^k u^i. \quad (2.1)$$

ahol u^i a folyadék négyes sebessége, ($u^i u_i = -1$),

$$u^i = \gamma \begin{pmatrix} 1 \\ v \end{pmatrix}, \quad u_i = \gamma \begin{pmatrix} -1 \\ v \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

$\gamma = (1 - v^2)^{-1/2}$, g_{ik} a metrikus tenzor, $g_{ik} = (-+++)$, $g_{ik} g^{kr} = \delta_i^r$ η és η' a nyíró és térfogati viszkózitási együtthatók és q_i a hőáram négyesvektora. A kétszer előforduló indexekre összegezni kell. ϱ és p a (3.8—9) egyenletek által definiált teljes energiasűrűség és nyomás.

Az energia- és impulzus-megmaradáson kívül a megmaradó barionszámról vonatkozó kontinuitási egyenletre is szükségünk van, amelyet relativisztikus formában a következőképp írhatunk:

$$n_{,r} u^r + n u^r_{,r} = 0, \quad (2.2)$$

ahol n a barionszám sűrűség. Ha bevezetjük a következő változókat

$$\begin{aligned} N &= \gamma n, & M^a &= T^{0a} = \gamma^2 (\varrho + p) v^a, \\ E &= T^{00} = \gamma^2 (\varrho + p v^2), & a &= 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2.3)$$

akkor a (2.1) energia-impulzus tenzorból a transzporttagok elhagyása után négyes divergenciát képezve, valamint (2.3)-at felhasználva a hidrodinamikai egyenleteket, a már ismerős alakban is megkaphatjuk:

$$\begin{aligned} DN &= -N \operatorname{div} v \\ DM &= -M \operatorname{div} v - \operatorname{grad} p \\ DE &= -E \operatorname{div} v - \operatorname{div}(pv) \end{aligned} \quad (2.4)$$

ahol D a $D = (\partial_t + (v \cdot \operatorname{grad}))$ operátort jelenti és a 3 egyenlet rendre a barionszám-, impulzus- és energia-megmaradást fejezi ki. A Los Alamos-i csoport számításaiiban kivétel nélkül ezt az egyenletrendszert használja, amely az összes transzport folyamatokat figyelmen kívül hagyja. Ezen elhanyagolások következményeit a következő fejezetben elemezzük.

2.5.2 Nemrelativisztikus határeset. — A relativisztikus hidrodinamika egyenleteiből $v \ll 1$, valamint $p \ll \varrho$ esetben megkaphatjuk a klasszikus hidrodinamika Navier—Stokes-egyenleteit (lásd pl. Lu78). Ezekben az egyenletekben már a hosszú hatótávolságú potenciálok hatását is figyelembe vehetjük:

$$\begin{aligned} DN &= -N \operatorname{div} v \\ DM &= -M \operatorname{div} v - \operatorname{div} P - u \operatorname{grad} U \\ De &= -e \operatorname{div} v - \operatorname{div}(P \cdot v) - \operatorname{div} q + v n \operatorname{grad} U \end{aligned} \quad (2.5)$$

ahol (mivel $\gamma = 1$) $N = n$, $M = nmv$, $e = \left(n(E, S) + \frac{1}{2} m v^2 \right)$ (lásd (3.8)), U a hosszú hatótávolságú potenciál, és a q hővezetés vektort a klasszikus $q = -\kappa \operatorname{grad}(T)$ képlettel helyettesítettük. A P nyomás tenzort a következő formában írhatjuk fel:

$$P_{ij} = p \delta_{ij} - \eta (\partial_j v_i - \partial_i v_j - 2 \delta_{ij} \operatorname{div}(v)/3) - \zeta \delta_{ij} \operatorname{div}(v), \quad (2.6)$$

ahol p a skalár nyomás és $\zeta = \eta' - 2\eta/3$, a térfogati a nemrelativisztikus esetben szokásos konvenció szerint (ζ ideális Boltzmann-gázban eltűnik (Hu63)). A (2.6) egyenletrendszer megoldásához az U potenciált is meg kell határoznunk. A maganyagban ezt a Coulomb és Yukawa-kölcsönhatások segítségével írhatjuk le $U = V_c + V_y$, amelyeket az alábbi egyenletek segítségével kaphatunk meg (Wo75):

$$(\nabla^2 - \alpha^2)V_y(r) = -4\pi\beta n(r) \quad (2.7)$$

ahol $\beta = -280 \text{ MeV fm}$ és $\alpha = 2,1/\text{fm}$. (Ezeket az értékeket úgy választottuk, hogy megfelelő magfelület alakuljon ki (Wo77)). A Coulomb-potenciál kiszámításánál konstans töltés—tömeg arányt feltételezünk:

$$\nabla^2 V_c(r) = -4\pi(Ze/A)^2 n(r). \quad (2.8)$$

Mint már említettük, a relativisztikus számításokban a potenciálok hatását nem vették figyelembe és ez lehetetlenné teszi a magok felületének leírását. A magsűrűség alatt fellépő negatív nyomások elkerülésére ezért élesen levágott sűrűségprofil kell alkalmazni. A tágulási szakaszban a negatív nyomások levágása azonban nemfizikai jellegű cseppek (droplet) kialakulásához vezetett (Am77).

Mind a relativisztikus, mind a nemrelativisztikus hidrodinamikai egyenletrendszer megoldhatóságához a fentiekén kívül még az állapotegyenletre is szükség van. Ez esetünkben inkább egy keresett szabad paraméternek tekintendő, mert amint a 3. fejezetben látni fogjuk, az állapotegyenletről a kérdéses tartományban csak korlátozott információ áll rendelkezésünkre.

A fenti egyenletrendszerek numerikus megoldása természetesen óriási problémákat jelent, amelyen általában nagyobb kutatócsoportok évekig dolgoznak. Ezért ezeket a problémákat a disszertációban nem érintjük. Csak azokban az esetekben teszünk kivételt, amikor a numerikus módszereknek a levont fizikai következtetésekre jelentős hatása van.

2.6 A lokális egyensúly feltevése

A magfizikában már korábban is gyakran és sikerrel alkalmazták a hidrodinamikai leírást (csepp modell), meg kell vizsgálnunk, mennyiben érvényesek a hidrodinamikai leírás feltevései a relativisztikus nehéz ion reakciók esetén.

Ha a részecskék mikroszkopikus mozgása egy makroszkopikus rendszerben olyan, hogy minden helyen és időben a lokális sebességeloszlás a termikusan egyensúlyi eloszláshoz közeli eloszlás, és ez pontról pontra csak lassan változik, akkor a rendszer leírható hidrodinamikával. Az egyensúly azonnali eléréséhez az szükséges, hogy a részecskék sűrűn ütközzenek, azaz hogy a szabad úthossz a rendszer jellemző méreteihez képest kicsiny legyen. Ezenkívül persze az is szükséges, hogy elegendően sok részecske alkossa a rendszert (mivel a hidrodinamikai leírás egy kontinuumot ír le) és hogy a reakcióidő elegendően hosszú legyen az egyensúlyra vezető mikroszkopikus folyamatok karakterisztikus idejéhez képest.

2.6.1 Az átlagos szabad úthossz. — A fentebb említett három premissza közül az átlagos szabad úthossz kicsinyisége a legkritikusabb. Az egész makroszkopikus reakció-

tartományhoz képest az átlagos szabad úthossz bizonyosan kicsiny, azonban a várakozások szerint fellépő lökéshullámok szempontjából már kétséges a helyzet.

A legegyszerűbb becslés az átlagos szabad úthosszra (Ku65):

$$\lambda \simeq 1/(n\sigma_{\text{tot}}\sqrt{2}) \quad (2.9)$$

ami normál sűrűség ($n_0=0,17 \text{ fm}^{-3}$) és átlagos 40 mb nukleon hatáskeresztmetszet mellett körülbelül 1—1,2 fm. Mindazonáltal ez a kifejezés túl egyszerű és több effektust nem tartalmaz. Alacsony gerjesztési energiák esetén a Pauli-elv miatt az átlagos szabad úthossz a maganyagban lényegesen hosszabb is lehet (Co80). Másrészt a sűrűség növekedése és kollektív jelenségek (Gy77) csökkenthetik az átlagos szabad úthosszat.

Tanihata és munkatársai (Ta81) elvégeztek egy kísérletet az átlagos szabad úthossz megállapítása céljából: proton+nehéz-mag ütközésben a kvázi elasztikus nukleon—nukleon hátraszórást vizsgálták és ennek alapján arra a következtetésre jutottak, hogy a proton átlagos szabad úthossza 2,4 fm a céltárgymagban. Mag—mag ütközésben ennél rövidebb átlagos szabad úthossz várható a sűrűsénövekedés és a másodlagos ütközések miatt.

A fentiek alapján az átlagos szabad úthossz 1—2 fm közé esik. Ez az érték elegendően kicsiny ahhoz, hogy a hidrodinamikai leírás a jelenséget jól közelítse, de nem elegendő ahhoz, hogy azt minden esetben szükségképpen jó leírássá tegye. Inkább az várható, hogy perifériális ütközések esetén a céltárgy és a nyaláb magok egymáson való áthatolása dominál, míg a hidrodinamika a centrális és az ahhoz közeli ütközésekben érvényes. A reakció végső fázisában, amikor a rendszer kitágul és az ütközések száma lecsökken, a szabad úthossz természetesen megnő és így ez a végső fázis hidrodinamikai módon már nem írható le.

2.6.2 Az egyensúly kialakulása. — Mivel a kezdeti sebességeloszlás az egyensúlytól igen távol van, az egyensúly még rövid átlagos szabad úthossz mellett sem jön létre azonnal. A nyaláb és a céltárgy mag nukleonjainak sebességeloszlása kezdetben jól közelíthető két, egymáshoz képest a nyaláb sebességével eltoltt Fermi-eloszlással. Az ütközés során ebből a kezdeti eloszlásból, az átfedési tartományban, egy termikus eloszlás kezd kialakulni. *Randrup* (Ra79) egy térben homogén modellben vizsgálta a termalizáció gyorsaságát az Uehling—Uhlenbeck-relativisztikus transzport egyenlet (Ue33, 34) megoldásával. Azt kapta, hogy a nyaláb energiájától függően körülbelül 4—8 fm/c idő alatt fejlődik az eloszlás annyira, hogy már jól közelíti a termikust. A termalizációt *Danielewicz* (Da80ab) szintén vizsgálta egy hasonló módszerrel és az előzővel megegyező eredményre jutott. Ez azt jelenti, hogy főleg az alacsonyabb energiák tartományában (0,2—1 GeV/n.) a reakció túlnyomó részében a hidrodinamikai leírás jó közelítésnek számít, magasabb energiákon viszont a kezdeti termalizációs szakasz a teljes ütközési folyamatnak már nem elhanyagolható részét teszi ki és ezért itt két- (Am78) vagy több (Lo81, Cs81f) folyadék hidrodinamikai leírás a célszerű.

A fentiek alapján a hidrodinamikai modell alkalmazhatóságáról a következőket mondhatjuk: Várható, hogy az ütközések bizonyos csoportjában (centrális ütközések, nehéz céltárgy és nyaláb mag) a hidrodinamikai leírás az ütközési folyamat túlnyomó részét jól közelíti. Az ütközés kezdeti pillanatait és a maganyag végső feltörését („break-up”) azonban nem írja le. Ez utóbbi folyamatot ezért más módon lehet csak leírni és ezért egy párolgási modellt kellett a hidrodinamikai modellhez

csatolni a kísérleti eredmények reprodukálhatósága érdekében. Az így kialakult modell alkalmazhatóságát végül is a gyakorlat kell, hogy eldöntse, azaz a kísérleti eredményekkel való összevetés. Az értekezés túlnyomó részben az erre irányuló munkákat tartalmazza.

3. A MAGANYAG ÁLLAPOTEGYENLETE ÉS VIZSGÁLATÁNAK KORÁBBI MÓDSZEREI

Ebben a fejezetben a maganyag azon legfontosabb tulajdonságait tárgyaljuk, amelyek a hidrodinamikai leírás szempontjából elkerülhetetlenül szükségesek és a későbbi eredmények megértéséhez nélkülözhetetlenek. A hidrodinamikai leírásban a maganyag tulajdonságaira vonatkozó információk zömét az állapotegyenlet foglalja magába, amely megadja a nyomást az energiasűrűség és a hőmérséklet (vagy entrópia) függvényében. Az Euler-egyenletek által leírt ideális folyadékok esetén egyedül ez a mennyiség hordozza az összes információt a tárgyalt folyadék tulajdonságairól. A jelenleg létező 2- és 3-dimenziós relativisztikus hidrodinamikai modellek ebbe az euleri kategóriába esnek. Ebben az esetben persze az a nem mindig kimondott feltevés érvényes, hogy az anyag lokálisan tökéletes termodinamikai egyensúlyban van, és a fenti termodinamikai paraméterekkel egyértelműen jellemezhető.

A hidrodinamika, viszkozitásról is számot adó, Navier—Stokes-egyenletek által leírt, formájában már további anyagi jellemzők is fellépnek, az úgynevezett kinetikus együtthatók, amelyek az anyag termodinamikai egyensúly közelében mutatott viselkedését írják le és az egyensúlyra vezető folyamatok erősségét határozzák meg.

A relativisztikus nehéz-ion reakciókban azonban a rendszer kezdetben nincs termodinamikai egyensúlyban, sőt még ennek a közelében sem. Ilyenkor a hagyományos perfekt vagy éppen viszkózus hidrodinamika is csak bizonyos korlátozott esetekben (alacsony ütközési energiákon) érvényes. A termodinamikai egyensúlytól távol levő rendszer hidrodinamikai leírásában további anyagi jellemzők is fellépnek, a P nyomás tenzor és a q hővezetés nem fejezhető ki az egyensúlyi jellemzők és kisebb additív transzport járulékok összegeként, és ebben az esetben a nyomás és energiasűrűség közti hagyományos egyensúlyi termodinamikai relációk sem érvényesek. Az ilyen rendszerek leírása esetén (a leírástól függően) több, új típusú, az anyagra jellemző mennyiség is felléphet. Ezek a mennyiségek a különböző fizikai állapothatározók transzportját illetve változását jellemzik, mint pl. anizotrópia vagy komponensek aránya a többfolyadék hidrodinamikában. Ezeket az anyagi jellemzőket speciális voltuk miatt a 8. fejezetben külön fogjuk tárgyalni.

Egyes nemrelativisztikus modellekben a hosszú hatótávolságú Coulomb és Yukawa-kölcsönhatás külön explicit figyelembe vehető, ami az alacsonyabb energiájú nehéz-ion reakciók esetében igen fontos felületi effektusok leírását pontosabbá teszi. A Coulomb és Yukawa-potenciálok bevezetése (a nyíró viszkozitáshoz és hővezetéshez hasonlóan) a relativisztikus hidrodinamikai modellek esetén eddig még nem valósult meg a fellépő gyakorlati nehézségek miatt.

A fent említett anyagi jellemzők közül az egyensúlyi állapotegyenlet az, amelyet az utóbbi 20 évben elméletileg igen sokat vizsgáltak és sok lehetséges anomális jelenség lehetőségére mutattak rá: (Lee—Wick-anomália (Le74), pion-kondenzáció

(Sa72, Mi73, Br76), kvark anyag (Ch79, Ku80, Ba81d, Bj79, Mc81, Gl81)). Ezen megfontolások rövid, átfogó bemutatása is messze meghaladná a jelen dolgozat kereteit, ezért csak néhány érdekesebb modellt vagy annak egy részét fogjuk a továbbiakban érinteni. Néhány általános megjegyzést azonban közös jellemzőikről (a fázisátalakulások figyelembevételéről a hidrodinamikai leírásban) ebben a fejezetben is teszünk.

3.1 Az egyensúlyi állapotegyenlet

A kiterjedt elméleti kutatások ellenére kísérleti ismereteink a maganyag egyensúlyi termodinamikai viselkedéséről eléggé hiányosak. A relativisztikus nehéz-ionreakciók vizsgálatát megelőzően mindössze a normál sűrűségű és alapállapothoz közeli (hideg) maganyag paramétereit ismertük meg, és igen kevés és indirekt információt nyerhettünk asztrofizikai megfigyelések alapján (Cs75). A hidrodinamikai vizsgálatokban a maganyag állapotegyenletét így egyszerű analitikus kifejezésekkel szoktuk közelíteni, amelyek a kísérletileg ismertnek tekinthető tulajdonságokat tükrözik. Ezek az egyensúlyi maganyag sűrűsége $n_0 = 0,145 - 0,17/\text{fm}^3$ (My76, Be71), kompresszibilitása $K = 180 - 240 \text{ MeV}$ (Bl76) és kötési energiája $W_0 = -8 \text{ MeV/nukleon}$ (illetve a Coulomb-kölcsönhatás explicit figyelembevétele esetén $W_0 = -15,96 \text{ MeV/nukleon}$ (My76). Így az energiasűrűség egyik legegyszerűbb analitikus kifejezése, amely a hideg maganyag paramétereit tükrözi az n baryonsűrűség függvényében a következő (St79):

$$e_c(n) = nE_c(n) = K(n - n_0)^2/18n_0 + nW_0. \quad (3.1)$$

A nyomás, a $dE = TdS - pdV$ termodinamikai összefüggésből következően, az E_c egy részecskére eső energia $V = 1/n$ fajtérfogat szerinti, állandó S fajlagos entrópia melletti deriválásával nyerhető;

$$p_c(n) = -\partial E_c/\partial V|_S = n^2 \partial E_c/\partial n|_S = K(n^2 - n_0^2)/18n_0. \quad (3.2)$$

A gerjesztési energia növekedése természetesen a nyomás és energiasűrűség növekedését okozza (legalább is az alapállapot közelében). A leggyakrabban használt hidrodinamikai modellekben ezt mint egy additív termikus járulékot vesszük figyelembe, ahol az E_T hőmérsékleti tagot leggyakrabban az ideális Fermi-gáz alacsony hőmérsékleti sorfejtésének első tagjával közelítjük (La54):

$$e(n, S) = e_c(n) + e_T(n, S) = n(E_c + E_T)$$

ahol

$$E_T(n, S) = S^2 n^{2/3}/2\beta \quad \text{vagy} \quad E_T(n, T) = \beta T^2/2n^{2/3},$$

$$S = \beta T/n^{2/3}, \quad \beta = m(g\pi/6)^{2/3}/\hbar^2 \quad \text{és} \quad g = 4. \quad (3.3)$$

Ez a korábbi munkákban alkalmazott T -négyzet rendű közelítés azonban már viszonylag alacsony energiáknál pontatlanságokra vezet (Cs80b). A hőmérsékleti tagnak az ideális Fermi-gáz (La54) kifejezésével való közelítése általában már kielégítő. A későbbiekben leírt számításokban ezt az alábbi analitikus kifejezéssel

közelítettük (St80bc):

$$E_T(n, T) = w(\sqrt{2,189\,14(T/w)^2 + 0.182\,23} - 0,426\,88; \quad T/w < 8,4$$

$$E_T(n, T) = 3/2 T - 0,6 w; \quad T/w < 8,4 \quad (3.4)$$

ahol $w = (\hbar c)^2/2mc^2(3\pi^2 n/2)^{2/3}$

a degenerált nukleon gáz fajlagos energiája a Fermi-felületen. (Itt és a továbbiakban is a $k_{\text{Boltzmann}}=1$ konvenciót használjuk.) Hasonlóképpen az energiasűrűséghez a nyomás is egy kompressziós és egy hőmérsékleti tagra szeparálódik:

$$p(n, S) = n^2 \partial E(n, S) / \partial n|_S = p_c(n) + p_T(n, S). \quad (3.5)$$

Az ideális Fermi-gáz közelítés esetén a termikus energiasűrűségből a hőmérsékleti nyomástagot a következő kifejezés szolgáltatja (La53):

$$p_T(n, S) = 2/3 e_T(n, S) \quad (3.6)$$

tetszőleges sűrűség és hőmérséklet mellett.

Az ideális Fermi-gáz közelítés akkor válik kritikussá, amikor a nagy sűrűségen és nagy hőmérsékleten bekövetkező fázisátalakulások esetén pontosan meg akarjuk határozni, hogy mely sűrűségnél és hőmérsékletnél lép fel a fázisátmenet. Ez a fázisátalakulás a nukleon gáz relativisztikussá válásával együtt vagy már annál korábban bekövetkezik (Ku80, Ra81). Ilyen esetekben az ideális gáz közelítés már túl durva és ezért a kölcsönhatást is figyelembe vevő modellekben számítják ki mindkét fázis állapotegyenletét (pl. a maganyagét a Walecka-féle átlag tér (mean-field) elméletben és a kvark anyagét a perturbatív kvantum kromodinamikával (Ku80). Ezek a számítások már önmagukban is igen bonyolultak, így a hidrodinamikai modellekben csak közelítő formában (interpolációval vagy polinom közelítéssel) vehetők figyelembe.

Az egyensúlyi állapotegyenletek tulajdonságait illetően relativisztikus nehéz ion ütközések esetén még egy fontos korlátot kell megemlítenünk. Az oksági elvből következően a hangsebesség nem haladhatja meg a fény sebességét:

$$v_h = c(\partial p / \partial \varrho|_S)^{1/2} < c, \quad (3.7)$$

$$\text{ahol } \varrho = \varrho(n, S) = n\{m_0 c^2 + E(n, S)\}, \quad (3.8)$$

a teljes tömegsűrűség a nyugalmi tömeget és a gerjesztési, valamint kölcsönhatási energiákat is beleértve. A teljes tömegsűrűség ismeretében relativisztikus esetben a nyomás, a hőmérséklet és kémiai potenciál is meghatározható (Lu78):

$$p = n \partial \varrho / \partial n - \varrho, \quad T = (\partial \varrho / \partial S) / n, \quad \mu = \partial \varrho / \partial n - S / n (\partial \varrho / \partial S). \quad (3.9)$$

Egyes hidrodinamikai modellekben az állapotegyenlet (Am77) nem elégítette ki az oksági feltételt nagy sűrűségek ($n > 5,3n_0$) esetén, mint ahogy ezt később többen észrevették (Da79, Cs80a, Ni79a). Az alapállapot közelében a hangsebesség viszonylag alacsony: $v_h = 0,16c$, átlagos $K = 210$ MeV-es kompresszibilitás mellett.

3.2 A maganyag kinetikus együtthatói

A hidrodinamikai leírás szempontjából a transzport folyamatok igen fontosak. Közülük is a viszkozitás az, amely különösen figyelmet érdemel. Eltűnő viszkozitás mellett az áramlás instabil és entrópia termelés (hőmérsékletemelkedés) sem lehetséges (Cs79a, 80a). Az óriás monopól rezonancia szélességből a maganyag térfogati viszkozitását becsülhetjük meg (Ta80c, Cs81c) az egyensúly közelében. Az alacsony energiájú mélyen rugalmatlan nehéz ion reakciók (5–20 MeV/nukleon), fúziós és hasadási kísérletek segítségével a nyíró viszkozitás értéke is meghatározható közelítőleg (Ni79b, Wi74). Ezen vizsgálatok alapján a maganyag viszkozitása az alapállapot közelében hozzávetőlegesen:

$$\eta \simeq 6 \text{ MeV}/fm^2 c. \quad (3.10)$$

Es az érték elegendően nagy az áramlás stabilizálására. A Reynolds-szám alapállapotú magok relativisztikus ütközése esetén

$$R = \rho L v / \eta \simeq 170, \quad (3.11)$$

ami alatta van az empirikusan ismert $R=1160$ -as turbulenciahatárnak. Azonban a nagy energiájú ütközésekben kialakuló lökéshullám vastagságát ez a viszkozitás-érték helytelenül túl vékonyra adja (0,5 fm) (Cs79a), és ezért a viszkozitás hőmérsékletfüggésének bevezetése elkerülhetetlen. Így számításainkban (Cs80b, Bu81a) a hőmérsékletfüggésnek azt a kifejezést alkalmaztuk, amely a Boltzmann-transzport elméletből első rendű közelítésben adódik (Hu63, Ga79b):

$$\eta = 1/3 \rho \lambda \langle v_{\text{term.}} \rangle \simeq \sqrt{m(T+T_0)} / 8 \sigma_{\text{tot}}, \quad (3.12)$$

ahol T_0 a hideg nukleongáz effektív hőmérséklete, amelyet például a degenerált Fermi-eloszlás átlagsebességéből számíthatunk ki:

$$T_0 = 9(3\pi^2/2)^{2/3} n^{2/3} (\hbar c)^2 / 16 mc^2.$$

Az alapállapotú és hőmérsékleti viszkozitást is figyelembe véve a lökéshullám szerkezetét sikerült a várákozásnak megfelelően leírni (Cs80b, Bu81a). Azokban az esetekben, ahol a viszkozitást elhanyagolták (Am75, 77) vagy helytelen hőmérsékletfüggést vezettek be (Ta80c), a hidrodinamikai modell helytelen eredményekre vezetett (negatív hőmérséklet, energiavesztés; lásd (Cs81c)).

A hővezetési együtthatóra vonatkozóan kísérleti információink ezidáig nincsenek. Az alacsony energiájú magreakciókban hővezetési folyamatok nem vizsgálhatók az alacsony gerjesztési energia és a kvantumfolyamatok dominanciája miatt. Ezért a legtöbb hidrodinamikai számításban a hővezetést elhanyagoljuk vagy kis állandó értéket alkalmazunk (Bu81a) a kinetikus elméletre (Hu63) alapozva:

$$\kappa = 3\eta/2m \simeq 0,015 c/fm. \quad (3.13)$$

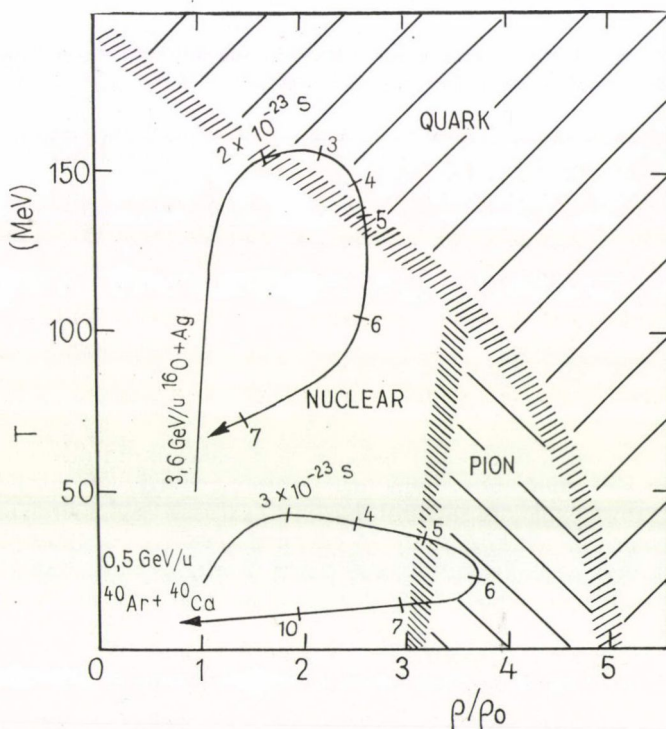
Amint az előzőekben láttuk, ahhoz, hogy a hidrodinamikai modellt alkalmazzuk, a relativisztikus nehéz ion reakciók leírására rendelkezésünkre áll a maganyag állapotegyenlete, sőt viszkozitását is ismerjük és tudjuk, hogy a kapott megoldások nem fognak turbulens instabilitásokat mutatni.

3.3 Fázisátalakulások

Az egyik legalapvetőbb motiváció a relativisztikus nehéz ion ütközések vizsgálatára az a lehetőség, hogy fázisátalakulások lépnek fel a felsűrűsödött maganyagban és ezek esetleg stabil vagy kvázistabil szupersűrű magállapotokra vezetnek.

Korábban számos elméleti munka jelent meg a pion kondenzáció lehetőségéről (Mi73, Br76, Sa72, To78). Azonban mint a későbbi elméleti vizsgálatok megmutatták, ezen állapot csak alacsony gerjesztési energiákon realizálható (Mü81), például neutron csillagokban (Mi79). A pion kondenzáció kimutatása céljából elvégzett nehéz ion kísérletek negatív eredménnyel zárultak (Sa80b), ami azt jelenti, hogy a pion kondenzáció kritikus hőmérséklete $T_c < 30\text{--}40\text{ MeV}$ (ha egyáltalán létezik).

A másik komolyan megvizsgálandó lehetőség a kvark anyag kialakulása. Ebben a fázisátalakulásban a maganyagot alkotó, három kvarkot tartalmazó „zsákok”



5. ábra. Fázis diagram a maganyagban várható fázisátmenetek illusztrálására (maganyag, kvark anyag, pion kondenzáció). A folytonos vonalak példaként azt mutatják, hogy mely tartományok érhetők el centrális relativisztikus nehéz ion reakciók során Gudima és Tonyejev kaszkád modell számításai szerint (Gu79). A trajektóriák mentén levő számok a kölcsönhatási időt adják meg. A legutóbbi kísérleti eredmények alapján (Sa80b) a pion kondenzáció kritikus hőmérséklete valószínűleg alacsonyabb, mint ahogy azt az ábra mutatja ($T = 10\text{--}30\text{ MeV}$), és ezért nem sikerült kísérletileg kimutatni

nagy sűrűsége és hőmérsékleten összeolvadnak és egy óriás kvark zsák alakul ki. Jelenlegi ismereteink éppen az átmeneti tartományban a legbizonytalanabbak, de az aszimptotikus tulajdonságok alapján feltételezhető, ($T \gg 200$ MeV, $n \gg n_0$), hogy ez az átmenet egy elsőrendű fázisátalakulás (Ku80). A szokásos van der Waals-típusú fázisátalakulástól azonban ez az átmenet sokban különbözik (5. ábra): Az átmenet normál magssűrűsége is létrejöhet elegendően nagy hőmérséklet (hozzávetőlegesen $T > 150\text{--}200$ MeV) esetén és a sűrűség növekedésével az átmeneti hőmérséklet csökken. Alacsony gerjesztési energiák esetén a várakozás szerint $5\text{--}10 n_0$ sűrűségnél megy végbe a fázisátalakulás. Ez a sűrűség és energiatartomány a nehéz ion reakcióban már valószínűleg a mai ütközési energiákon is elérhető, és az ütközési energia néhány GeV-val való emelése után pedig már bizonyosan. A kvark anyag létrehozása laboratóriumban óriási jelentőségű volna és alapvető fizikai ismereteinket nagy mértékben bővítené.

A problémát az jelenti, hogy a kvark anyag létrejöttének jeleit hogyan észlelhetjük. A szabad kvarkok bezártsága miatt az óriás kvark zsák létrejöttét nem vehetjük közvetlenül észre, és így közvetett másodlagos hatásait kell vizsgálnunk. Ezek egyrészt olyan egzotikus részecskék keltésében nyilvánulhatnak meg, amelyek normái magreakciókban nem, vagy csak igen kis mértékben keletkeznek. A másik észlelhető közvetett hatás a fázisátalakulásnak a hidro- és termodinamikai folyamatra gyakorolt hatásában keresendő. A relativisztikus nehéz ion reakciók hidrodinamikai leírása során ezen második lehetőséget vizsgáljuk.

A fázisátalakulások beillesztése a hidrodinamikai leírásba nemtriviális probléma, mivel a hidrodinamikai folyamatok és a fázisátalakulást eredményező kvantum-folyamatok időskálája azonos vagy egymáshoz közeli is lehet (Bi81). Így erre a problémára az értekezés eredményeit tartalmazó részben visszatérünk (7.1 pont) a fázisátalakulások hatásainak vizsgálatával együtt.

3.4 Az állapotegyenlet vizsgálata asztrofizikai módszerekkel

Mielőtt rátérnénk a relativisztikus nehéz ion reakciók hidrodinamikai leírására, feltétlenül meg kell említenünk, hogy már korábban is nyerhettünk bizonyos információkat az anyag tulajdonságairól hasonló sűrűség- és energiatartományban. Ezek az információk igen közvetettek, s mivel a kísérleti körülményeket itt befolyásolni nem tudjuk, csak kis számú és korlátozott megfigyelési eredményre vagyunk utalva. Ezek alapján csak azt tudjuk eldönteni, hogy egy adott állapotegyenlet összeegyeztethető-e az észlelésekkel, de a nagy számú lehetséges eset közül általában nem tudjuk a megfelelőt kiválasztani. A lehetőségek érzékeltetésére érdemes az alábbi két példát megemlíteni.

3.4.1 Relativisztikus csillagvégalapotok, neutroncsillagok. — Csillagászati észlelések alapján ezen objektumok tömegét tudjuk meghatározni. Egy adott állapotegyenlet esetén a Tollman—Oppenheimer—Volkoff-egyenletek (Op39) megoldásával ez elméletileg lehetséges maximális neutroncsillag-tömeg meghatározható (pl. Cs75), és ha ez a maximum kisebb mint a létező legnagyobb neutroncsillag tömege, ez a kiindulási állapotegyenlet helytelen voltát mutatja.

A neutroncsillag forgásában bekövetkező hirtelen változások időfüggéséből a hideg neutronanyag kis viszkozitására, illetve folyékonyságára következtettek.

3.4.2. *Univerzummodellek.* — Számos független csillagászati megfigyelés (vöröseltolódás, izotóp háttérsugárzás, az univerzum anyagösszetétele) és az általános relativitáselmélet csak egy kezdeti robbanás a „big-bang” feltételezésével egyeztethető össze. E robbanás kezdeti szakaszát elméleti módszerekkel széleskörűen vizsgálják, és ezen vizsgálatokhoz kiindulásként a sűrű és forró anyag állapotegyenletére is szükség van. Egy állapotegyenlet elvethető annak alapján, ha a megfigyelésekkel ellentétes eredményekre vezet.

Annak ellenére, hogy az asztrofizikai információk alapján viszonylag kevés információt nyerhetünk az anyag állapotegyenletéről, az utóbbi hatvan évben az ezen a téren elért elméleti fejlődés a relativisztikus nehézion fizika szempontjából óriási jelentőségű, mert az itt felhasznált elméleti módszerek túlnyomó többségét az asztrofizikában vagy az ottani felhasználás érdekében dolgozták ki (pl.: relativisztikus hidrodinamika, relativisztikus statisztikus fizika, két folyadék (e, p plazma (Th62)) hidrodinamika).

4. A PÁROLGÁSI MODELL

Mint már említettük, a hidrodinamikai leírás nem érvényes az egész ütközési folyamatra. Különösen a végső fázisban adódnak problémák, ahol például a nyomás negatívvá válhat. Ekkor a maganyag feltörik („break-up”) és szabad nukleonok, valamint könnyű atommagok alakulnak ki. Az összefüggő maganyag tehát egy több komponensű ideális gázzá alakul át. Ezek és a forró állapotban keletkezett egyéb részecskék (pl. pion, K-mezon) mind elérik később a detektorokat. Ez a fázisátalakulás hasonló ahhoz, amit például a neutroncsillagok felületi rétegeiben feltételezünk (Cs75), de mivel ez itt egy elég kis méretű és gyorsan változó rendszerben jön létre, leírása jóval nehezebb feladatot jelent. A fokozatos és valószínűleg többlépcsős átmenetet ezért egy ugrás szerű feltöréssel közelítjük. Ez a közelítés az asztrofizikában hasonló esetek leírására már jól ismert volt, és egy hasonló elképzelést egy egyszerű gömbszimmetrikus modellben korábban már a nehézion reakciók témakörében is bevezettek (Bo78). Az általános hidrodinamikai modellekben azonban problémát okozott a hatáskeresztmetszetek reprodukálása, mert a maganyag áramlása éles csúcsokat és a kísérlettel nem megegyező energiafüggést eredményezett (Am75, 77, 78, St80d). Az ok abban rejlett, hogy a detektorokhoz érkező részecskéknek nem csak áramlási-, hanem számottevő termikus sebességkomponensük is van. Ezt eleinte a folyadékcillák nukleonokra való formális feltörésével és a nukleonok sebességéhez random irányú és energiájú, termikus eloszlású sebességkomponens hozzáadásával próbálták leírni (Da79). A hatáskeresztmetszetet pedig az így kapott részecskék irány és sebesség szerinti összeszámlálásával kapták meg, ami nagy statisztikus hibákhoz vezetett.

Ennek a problémának a megoldására dolgoztuk ki az alábbi párolgási modellt (Cs79b, 80b), amely a korábbi gömbszimmetrikus hatáskeresztmetszetszámítás (Bo78) relativisztikus és geometriai általánosításának is tekinthető. A továbbiakban a modellt két változatban mutatjuk be.

4.1 A nukleon hatáskeresztmetszet

Ha egy folyadékcella egy idő után eléri a feltörési feltételt (pl. $n < 0,75 n_0$ vagy $p < 0$), a benne levő nukleonok termikus sebességük hatására minden irányban szétrepülnek (az egyes nagyobb és sűrűbb maganyag-darabok árnyékoló hatásától (Zi80) most eltekintünk).

Az i -edik folyadékcellán belül a nukleonok impulzuseloszlását a relativisztikus Fermi-eloszlással közelítjük:

$$f_i(p) = 4 / \{ (2\pi\hbar)^3 (\exp(((m^2 + p^2)^{1/2} - \mu_i)/T_i) + 1) \}, \quad (4.1)$$

ahol a μ_i -kémiai potenciált az

$$n_i = 4 / (2\pi\hbar)^3 \int d^3p f_i(p), \quad (4.2)$$

normalizálási feltételből határozzuk meg. Degenerált gáz esetén ($T=0$) az eloszlás a p_F Fermi-impulzusnál élesen levág és ekkor

$$\mu_i^0 = (m^2 + p_F^2)^{1/2} = (m^2 + \hbar^2(3\pi^2 n/2)^{2/3})^{1/2}.$$

Véges hőmérsékletek esetén a normalizálás bonyolultabb (lásd pl. (Mo79)).

Mivel a folyadékcellák a lokális kollektív $v(r)$ sebességgel mozognak ($\beta = v/c$), az $f(p)$ egyensúlyi impulzuseloszlást a laboratóriumi rendszerbe kell transzformálni. Az eloszlások Lorentz-transzformációja a következőképpen végezhető (By73):

$$f_i^{\text{lab}}(P) = W_i(P, W) / W \quad f_i^{\text{cell}}(p_i(P, W)), \quad (4.3)$$

ahol $p, w(P, W)$ rendre az együttmozgó (és lab.) rendszerbeli négyes impulzus komponensei, amelyeket az alábbi relációk kötnek össze:

$$w_i(P, W) = \gamma_i(W - \beta_i P), \quad p_i(P, W) = P - \gamma_i \beta_i (w + W) / (1 + \gamma_i), \quad \gamma_i = 1 / \sqrt{1 - \beta_i^2} \quad (4.4)$$

A j típusú részecskék háromszor differenciális hatáskeresztmetszetét az egyes folyadékcellák járulékanak felösszegezésével nyerjük:

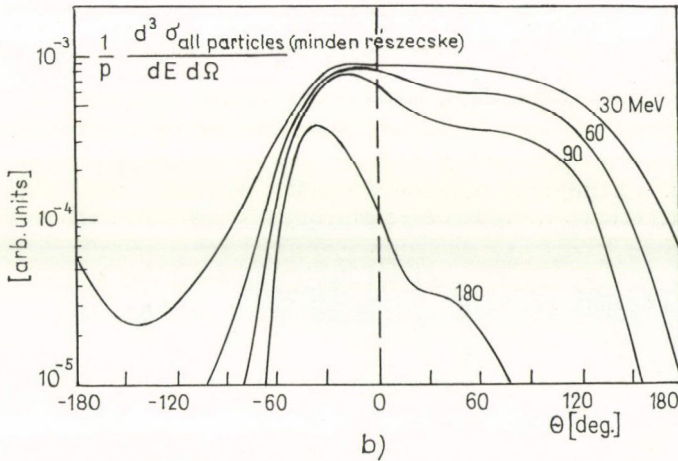
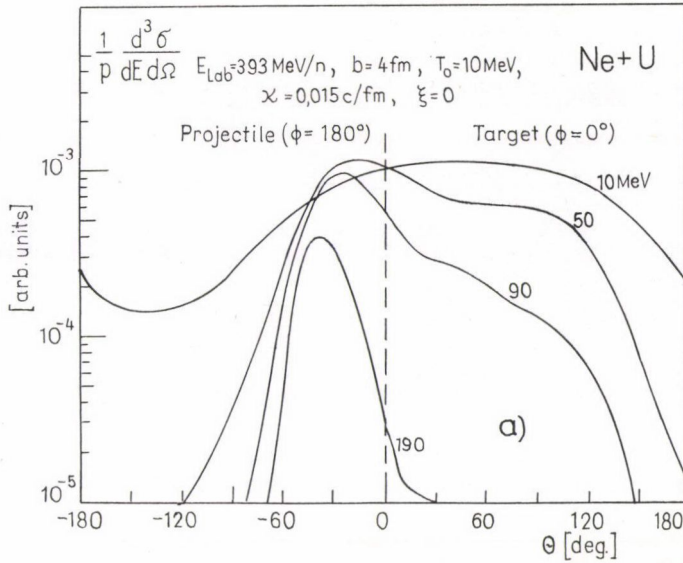
$$\begin{aligned} \sigma_j(\theta, \Phi, E) &\equiv d^3\sigma_j / dE d\Phi d\cos\theta = \\ &= \sum_v \sigma^0(b) \text{Vol}_i w_i(P, W) \sqrt{W^2 - m_j^2} f_i^{\text{cell}}(p_i(P, W)), \end{aligned} \quad (4.5)$$

ahol Vol_i az i -edik folyadékcella térfogata. Egy általános 3-dimenziós számítás esetén a különböző ütközési paraméterű számítások járulékait is összegeznünk kell, mindegyiket súlyozva a megfelelő felülettel:

$$\sigma^0(b) = 2\pi b \Delta b.$$

Megmutattuk (Cs80b), hogy az így kapott hatáskeresztmetszet egy centrál-szimmetrikusan táguló gömbhéj esetében, relativisztikus Boltzmann-eloszlást feltételezve (4.1) helyett, analitikusan kiintegrálható és a „blast-wave” modell (Si79a) kifejezését adja vissza.

4.1.1 Szabad és összes nukleon hatáskeresztmetszet. — Az itt leírt relativisztikus evaporációs modell természetesen nemrelativisztikus hidrodinamikai modellhez is



6. ábra. Invariáns nukleon hatáskeresztmetszet Ne+U reakcióra 393 MeV/n. nyaláb energia esetén. A reakciót egy két dimenziós hidrodinamikai modellel írtuk le (Bu81ab) egy kiválasztott, $b=4$ fm ütközési paraméter mellett. A háromszor differenciális hatáskeresztmetszetet ($dE, d\varphi, d\cos\theta$) a reakció síkban ábrázoltuk két rögzített φ azimutszögnél. A görbék paraméterei az emittált nukleonok energiáját jelzik. Az (a) ábra a szabad nukleon, míg a (b) az össz nukleon hatáskeresztmetszetet adja meg (ez a kis magokban kötött állapotban emittált nukleonokat is tartalmazza)

illeszthető, amelyben az egyes folyadékcellák kötési energiája is kiszámítható. Ez lehetőséget nyújtott arra (Bu81ab, St80e), hogy megbecsüljük először egyszerűsített módon a szabad nukleonok és az összes (beleértve a kis atommagok formájában emittált) nukleonok hatáskeresztmetszetét. A következő eljárást választottuk: a (4.1) relativisztikus Fermi-eloszlást az energiatengelyen negatív irányba eltoluk a kötési energia értékével és az evaporációban csak azokat a nukleonokat vettük figyelembe, amelyek az eloszlás pozitív energiájú részébe estek. Az együttmozgó kiindulási eloszlást ezek számára (4.1) helyett az eltoló Fermieloszlás pozitív energiás vége szolgáltatja. Így a nukleonoknak csak egy része (10–20%) vett részt a párolgásban. Az általuk létrehozott hatáskeresztmetszetet az előző pontban leírtak szerint számítottuk ki.

A 6. ábrán láthatjuk a szabad nukleon hatáskeresztmetszet és az összes nukleon hatáskeresztmetszet összehasonlítását, amelyet a 2-dimenziós hidrodinamikai modellben kaptunk (Bu81a). A hatáskeresztmetszet az azimut szögtől is függ, azonban az azimut függést eddig csak korrelációs kísérletek mutatták ki, és azimutfüggő hatáskeresztmetszetek kísérleti meghatározását a közeljövőben várhatjuk. Látható, hogy a hidrodinamikai modell más modellektől eltérően erős azimutfüggést jósol, ezért amikor csak mód van rá nemcsak az azimutra átlagolt, hanem az azimutfüggő hatáskeresztmetszetet is kiszámítjuk.

4.2 Kémiai egyensúly a párolgásban

A fentiekben csak közelítő módon próbáltuk meghatározni a szabad és összes nukleon hatáskeresztmetszeteket. A kísérletekben azonban a keletkezett kis atommagokat nagy számban és egymástól jól megkülönböztethetően észlelik. Igen sok kísérlet mutat arra (Na81, Gu76, Go77, Le79, Ka77), hogy ezek az atommagok termikus egyensúlyban keletkeznek.

Ez a feltételezés már a tűzgolyó (fire-ball) (We76) és a tűzcík (fire-streak) (My78) modelleknek is alapjául szolgált, de ezekben globális termikus egyensúlyt tételeztek fel. A hidrodinamikai modell lokális egyensúly feltevés magától érthetővé teszi az ötletet, hogy a termikus egyensúlyon túl a maganyag feltörésekor a lokális kémiai egyensúly feltevésével éljünk. A feltevés jogosságát egyes vizsgálatok igazolták (Ka80a), azonban még jelenleg is folynak vizsgálatok a kémiai egyensúly beállításának meghatározására (Ba81b).

4.2.1 Kémiai egyensúly könnyű magok között. — A kémiai egyensúly következményeit az irodalomban részletesen tárgyalják (Me77, 78ab, Go78). Ebben a pontban röviden ismertetjük az itt használt módszereket és néhány érdekes következményt a (Su81) hivatkozás alapján, ahol a megfelelő kvantum statisztika (QS), a részecskék saját térfogata és az alfa részecskék Bose-kondenzációja lehetőségének fontosságára mutattunk rá.

Legyen a rendszerben kezdetben N neutron és Z proton. Ha alfa részecskékig bezárólag megengedjük könnyű atommagok keletkezését a barion- és töltés-megmaradás szerint:

$$\begin{aligned} N_n + N_d + N_{^3\text{He}} + 2N_t + 2N_{^4\text{He}} &= N, \\ N_p + N_d + 2N_{^3\text{He}} + N_t + 2N_{^4\text{He}} &= Z, \end{aligned} \quad (4.6)$$

ahol N_i az i típusú részecskék száma az egész rendszerben. Jöjjön létre a kémiai egyensúly V_{ext} térfogatban (vagy sűrűségnél) T hőmérséklet mellett. A részecskék szabadon azonban csak egy kisebb V térfogatban mozoghatnak, amelyet a V_{ext} térfogattól a részecskék V_i saját térfogatának levonásával nyerhetünk

$$V = V_{\text{ext}} - \sum_i N_i V_i, \quad n = (N + Z)/V_{\text{ext}}. \quad (4.7)$$

Az így adódó „pontoszerű” sűrűség, $n_{\text{pt}} = (N + Z)/V$, lényegesen nagyobb, mint a feltörési sűrűség n , és így a kvantum effektusok szerepe megnő.

Fermionok esetén N_i -t a következő egyenlet szolgáltatja:

$$\lambda_i^3 N_i / g_i V = (2/\sqrt{\pi}) F_{\text{FD}}(v_i), \quad i = p, n, {}^3\text{He}, t, \quad (4.8)$$

ahol $\lambda_i = h/\sqrt{(2\pi m_i T)}$, a részecske de Broglie hullámhossza és $g_i = 2S_i + 1$ a degenerációs faktor. Az i részecske kémiai potenciálja:

$$v_i = \beta \mu_i = \mu_i / T,$$

és

$$F_{\text{FD}}(v) = \int_0^\infty dx \sqrt{x} / (\exp(x - v) + 1).$$

Bozonok esetén pedig:

$$N_i = 1 / (\exp(\alpha_i) - 1) + (g_i V / \lambda_i^3) F_{\text{BE}}(\alpha_i), \quad i = d, {}^4\text{He}, \quad (4.9)$$

ahol $\alpha_i = -\beta \mu_i$, az első tag adja a kondenzált részecskék számát és

$$F_{\text{BE}}(\alpha) = \sum_{n=1}^\infty \exp(-n\alpha) / n^{3/2}. \quad (4.10)$$

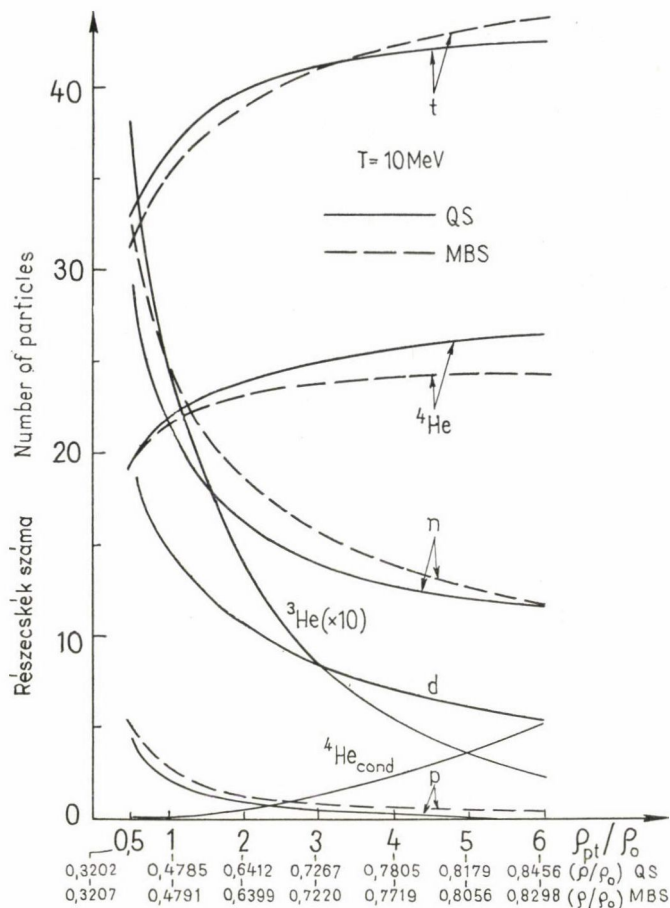
Kémiai egyensúly esetén a kémiai potenciálok közt fennáll a következő egyenlőség:

$$\mu_i = Z_i \mu_p + N_i \mu_n + E_i, \quad (4.11)$$

ahol $E_i = Z_i m_p c^2 + N_i m_n c^2 - m_i c^2$, az i típusú fragment kötési energiája. A kémiai potenciálok közti összefüggés ismeretében az egyes részecskék száma meghatározható.

A 7. ábrán egy kémiai egyensúlyban levő rendszer összetételének változását mutatjuk be a feltörési sűrűség függvényében ($N=156$, $Z=102$ és $T=10$ MeV). Megjegyzendő, hogy az N_n/N_p arány mindig nagyobb mint N/Z és N/Z -t csak nagyon alacsony sűrűségnél közelíti, a kísérletekkel megegyezően (Sa80, Sc79a, St80a). Szintén említésre méltó, hogy a részecskék sajátterfogata miatt kémiai egyensúly ezen részecskék között csak normál magsűrűség alatt jöhet létre.

A 7. ábrán látható, hogy alacsony hőmérsékleteken ($T < 10$ MeV) számottevő mennyiségű ($> 10\%$) kondenzált alfa részecske keletkezhet. Ez a kondenzált fázis, mivel termikus sebessége az anyag nyugalmi rendszerében nincs, a kollektív folyási sebességgel mozog. Hasonló Bose-kondenzációs folyamatot jósoltak Zimányi és munkatársai pionok esetén (Zi79), de a kondenzált alfa részecskék kísérleti kimutatásához több reményt fűzhetünk (Su81).



7. ábra. A különböző részecskék száma a sűrűség függvényében $T = 10 \text{ MeV}$ feltörési hőmérsékletnél. A ρ_{pt} a pontszerű részecskék sűrűsége $\rho_{pt} = (N + Z)/V$ és $\rho_0 = 0,17/\text{fm}^3$ a normál maganyag sűrűsége. A megfelelő feltörési sűrűség, amely a részecskék saját térfogatát is figyelembe veszi, szintén jelölve van. A kvantum statisztika (QS) több alfa részecskét produkál, mint a Maxwell-Boltzmann-statisztika (MBS). A két statisztika eredményei kis feltörési sűrűségeknél közelítik egymást. A ${}^4\text{He}_{\text{cond}}$ jelű vonal a Bose-kondenzálódott alfa részecskék számát mutatja

4.2.2. *A kémiai egyensúly beillesztése a párolgási modellbe.* — A feltörés pillanatában minden folyadékcellában ismert a belső energia, a barionsűrűség és homogén töltés eloszlást feltételezve a töltés is. A több ezer folyadékcella miatt a kémiai egyensúlyt most a lehető legegyszerűbb módon Boltzmann-statisztikával írjuk le, és a részecskék saját térfogatát is elhanyagoljuk. Így a különböző magok sűrűsége a következőképpen adható meg (Me77, 78, Ka77):

$$n_i(n_p, n_n, T) = a_i n_p^{Z_i} n_n^{N_i},$$

ahol

$$a_i = \lambda_T^{3A_i-3} A_i^{3/2} 2^{-A_i} \exp(E_0^{(i)}/T) \Sigma_j (2S_j + 1) \exp(-E_j^{(i)}/T). \quad (4.12)$$

Egy Z_i töltésű és N_i neutron tartalmazó ($A_i = N_i + Z_i$) i fragment sűrűsége tehát a keverék T hőmérsékletétől, az n_p, n_n proton és neutron sűrűségtől és a fragment fizikai tulajdonságaitól (az alapállapot $E_0^{(i)}$, és a gerjesztett állapotok $E_j^{(i)}$ energiájától és S_j spinjétől) függ. Az n_p, n_n és T ismeretlen paraméterek a barionszám, töltés és energia megmaradásából határozhatóak meg

$$\begin{aligned} n &= A_{\text{cell}}/V_{\text{cell}} = \Sigma_i n_i A_i, \\ nZ/A &= Z_{\text{cell}}/V_{\text{cell}} = \Sigma_i n_i Z_i, \\ E_{\text{cell}}^{\text{int}}/V_{\text{cell}} + nm_p &= \Sigma_i n_i (m_i + 3T/2), \end{aligned} \quad (4.13)$$

ahol n a folyadékcella barion sűrűsége és $E_{\text{cell}}^{\text{int}}$ pedig teljes belső energiája a kötési energiát is beleértve. A komponensek sűrűségének és az egyensúlyi hőmérséklet ismeretében a folyadékcellán belül minden komponens impulzuseloszlása megadható:

$$d^3 n_i(p)/dp^3 = V_{\text{cell}} n_i (2\pi m_i T)^{-3/2} \exp(-p^2/2m_i T). \quad (4.14)$$

Ezekután a 4.1 pontban leírt módon minden egyes komponens háromszor differenciális hatáskeresztmetszete kiszámítható. Az eljárás így leírva egyszerűnek tűnik, de a (4.10) csatolt egyenletrendszer megoldása több ezer folyadékcella esetén és utána a hatáskeresztmetszetek kiszámítása igen számítógépigényes. (Egy IBM 3033 típusú számítógépen egyetlen ütközés 10 óra gépidőt és 3,5 MegaByte memóriát igényel. A gépidő az „Array Processor” felhasználása esetén is csak 3 órára csökken.)

A 8. ábrán egy ilyen számítás eredményét mutatjuk be. Az egyes térbeli tartományok különböző sűrűségének és hőmérsékletének hatása észlelhető a hatáskeresztmetszeten. Az alfa hatáskeresztmetszeten legerősebben észrevehető két csúcs viszonylag hidegebb tartományok létezését jelzi. A jelenség okára a hidrodinamikai modell eredményeinek kapcsán még visszatérünk.

A fenti feltörési folyamat során a rendszer entrópiája tovább növekszik és ez a növekedés nem elhanyagolható lökeshullámban létrejött és a viszkózus folyamatok által okozott entrópiánövekedéshez képest. A végső fázisban észlelhető összes faj-

1. TÁBLÁZAT

A kibocsájtott részecskék száma különböző ütközési paraméterek mellett. Mivel a modellben az alfa részecske a legnehezebb, ezek tartalmazzák a valóságban nehezebb részecskék formájában emittált nukleonokat is. Az átlagos feltörési sűrűség n , és az átlagos belső energia E^{int} a feltörési pillanatában értendő. M a részecskék multiplicitása

b fm	p	n	d	t	^3He	^4He	q 1/fm ³	E^{int} MeV/ n
2	12,8	40,0	17,8	16,3	3,3	27,7	,077	7,87
6	13,6	34,1	13,3	9,7	2,2	37,0	,070	5,46
8	8,4	23,6	9,7	9,4	1,7	43,1	,084	0,76
9	5,0	17,1	6,7	7,5	1,2	49,4	,100	-2,44
M	9,9	28,7	11,9	10,7	2,1	39,0		

5. A LÖKÉSHULLÁMOK TANULMÁNYOZÁSA

A tárgyalt energiatartományban a nyalábsebesség már mindenütt szuperzonikus és így a magok centrális ütközésénél egy lökeshullám alakul ki, amelyben a beáramló anyag lelassul, felsűrűsödik. Ezt a folyamatot már viszonylag egyszerű modellekben is tanulmányozhatjuk.

5.1. Relativisztikus Rankine—Hugoniot-egyenletek

Ha eltekintünk a lökeshullám belső szerkezetétől, akkor a megmaradási tételekből egyszerűen megkaphatjuk a felsűrűsödött és már egyensúlyban levő anyag jellemzőit. Az x -tengely mentén a lökeshullámhoz rögzített rendszerben az anyag, energia és impulzus áram folytonosságának feltétele a következő egyenletekre vezet:

$$\begin{aligned} [nu_x] &= 0, \quad [T_{0x}] = [(\varrho + p)u_0 u_x] = 0, \\ [T_{xx}] &= [(\varrho + p)u_x^2 + p] = 0, \quad \text{ahol} \quad [a] = a_2 - a_1. \end{aligned} \quad (5.1)$$

(A 2-es állapot a felsűrűsödött, az 1-es a beáramló normál maganyagot jelzi.) Ezekből az egyenletekből meghatározhatjuk a lökeshullámon átjutó $j = nu_x$ anyagáramot:

$$j^2 = -[p]/[H/n], \quad \text{ahol} \quad H = (\varrho + p)/n \quad (5.2)$$

a fajlagos entalpia. A sebességek kiküszöbölésével a felsűrűsödött állapot p_2 nyomását és ϱ_2 sűrűségét (5.2) segítségével már megadó relativisztikus lökés adiabata (Ta48) egyenletét kapjuk:

$$[p] \cdot \{H/n\}_+ = [H^2], \quad \text{ahol} \quad \{a\}_+ = a_1 + a_2. \quad (5.3)$$

Az 1. kiindulási és a 2. felsűrűsödött anyag relatív v sebessége (ami megegyezik a nyaláb sebességközépponti rendszerben mért sebességével, illetve szimmetrikus ütközés esetén tömegközépponti rendszerben mért sebességével) a következő:

$$v^2 = \frac{(p_2 - p_1)(\varrho_2 - \varrho_1)}{(p_2 + \varrho_1)(p_1 + \varrho_2)}. \quad (5.4)$$

Meg kell említeni, hogy a nemrelativisztikus leírás következtetéseivel ellentétben az n_2/n_0 felsűrűsödés nem korlátos, hanem a végtelenig növekedhet aszimptotikusan (ha $v \rightarrow c$) mint $5\gamma/2$.

5.1.1 A lökeshullám belső szerkezete. — Mint már a hidrodinamikai leírás történetének rövid ismertetésekor említettük, a lökeshullám tulajdonságait már a 70-es évek elején sokan vizsgálták. A részletes hidrodinamikai számítások megkezdésekor problémák mutatkoztak a numerikus modelleknél, amelyek nem adták vissza megfelelően a várható lökeshullám viselkedést. Ezen problémák tisztázására egy egydimenziós numerikus számítást végeztünk el (Cs79ab, 80a) vizkózus relativisztikus hidrodinamikai modellben. A vizkozitás figyelembevétele 1-dimenzióban relativisztikus

tikusan viszonylag egyszerűen megtehető és a kontinuitási egyenlet felhasználásával a fellépő viszkózus tagok $\eta''(g^{ik} + u^i u^k) u^r_{,r}$ a nyomáshoz csatolhatók. (Egy dimenziós esetben egy $\eta'' = 4\eta/3$ effektív térfogati viszkozitást kell alkalmazni, feltéve, hogy $\zeta = 0$ (Cs80b).) Így a (3.2)-vel megegyező egyenletrendszerre juthatunk, ahol azonban a p nyomás helyébe

$$p' = p + \eta'' \gamma (Dn)/n$$

helyettesítendő. Az így kapott egyenletrendszert közelítőleg, Lagrange-módszerrel oldottuk meg. Az entrópia-változás leírására közvetlen egyenletrendszert vezettünk le a $T^{ik} u^i = 0$ egyenletből az állapotegyenlet tulajdonságainak kihasználása mellett (csak egy fázis esetén):

$$DS = \eta'' \gamma (Dn)^2 / (n^3 T). \quad (5.5)$$

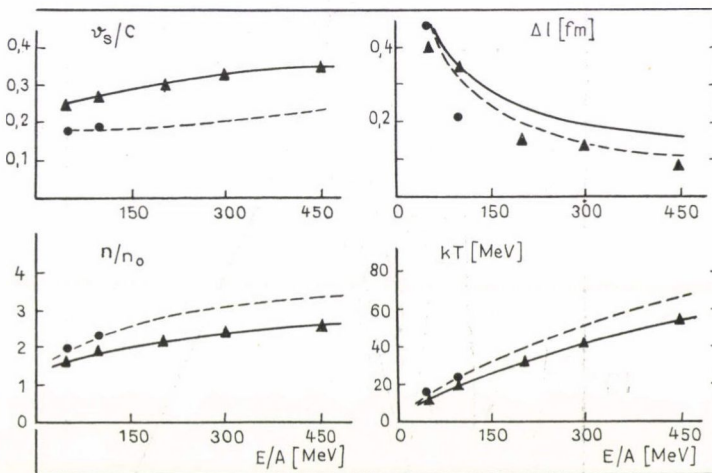
Amint látható, eredményünk azt mutatja, hogy az entrópia növekedése eltűnő viszkozitás mellett nem lehetséges, és mivel a kezdeti állapotban a maganyag hideg ($T=0$), még adiabatikus folyamatban sem érhetünk el hőmérsékletemelkedést. Következésképp az Euler-i hidrodinamikában (Am75, 77, Da79) elvileg csak hideg maganyagot írhatnánk le.

A numerikus számítások azonban hőmérsékletemelkedést mutattak. Mint rámutattunk (Cs80a), ennek oka az egyenletek számítógépen történő megoldása során fellépő numerikus viszkozításban (Ha76) rejlett. Az energia- és impulzus-megmaradás helyes kezelése a numerikus programokban megfelelő felsűrűsödést és hőmérsékletemelkedést eredményezett, de a lökeshullám belső szerkezetét a numerikus viszkozitás határozta meg. Ahogyan később megvizsgáltuk (Cs81g) a numerikus viszkozitás értéke a hideg maganyag viszkozitásával nagyjából megegyezik a jelenlegi 2- és 3-dimenziós számításokban. Így a viszkózus hatások csak a viszkozitás növelése mellett vizsgálhatók, és ennek figyelmen kívül hagyása (Ta80c) helytelen eredményre vezet. Az általunk kidolgozott Lagrange-módszeren alapuló 1-dimenziós viszkózus relativisztikus modell (Cs79ab, 80a) lehetőséget adott a viszkózus effektusok jobb tanulmányozására és a lökeshullám belső szerkezetének vizsgálatára. Megállapítottuk, hogy az állandó viszkozitási együttható feltételezése arra vezet, hogy a lökeshullám szélessége az energia növelésével csökken és magasabb energiákon (400 MeV/n.) irreálisan kis értéket vesz fel (0,1–0,2 fm). Összehasonlítottuk számításaink eredményét a Rankine–Hugoniot-egyenletek által meghatározott sűrűség és hőmérsékletnövekedéssel és kiváló egyezést találtunk (9. ábra), ami a numerikus módszer nagy pontosságát igazolta.

Egy további fontos eredmény, hogy e számítások kapcsán megállapítottuk, hogy az entrópia nem csak a lökeshullámban növekszik, hanem a tágulás során is, az (5.5) egyenletből következően. Így a tágulás nem adiabatikus, mint ahogy korábban sokan feltételezték (Bo79, Si79), hanem kb. 20% további entrópiánövekedést érhetünk el alatta (Cs79a). Ezen eredményünket később felhasználták a reakcióban termelt entrópia meghatározásánál (St81b).

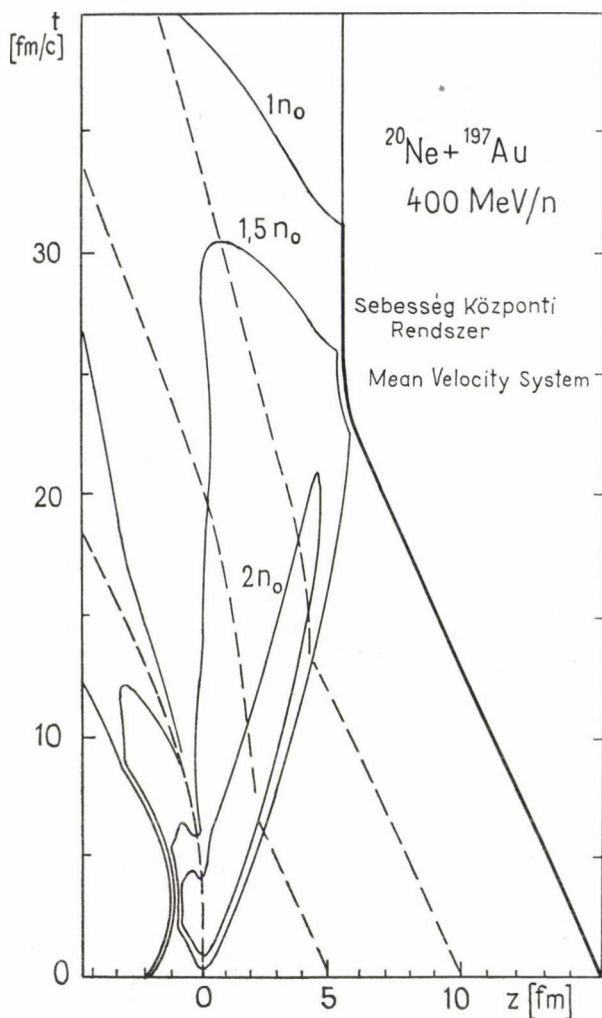
5.1.2 A Rankine–Hugoniot-közelítés érvényessége. — A fejezet elején leírt egyenletek csak idealizált, stacioner, 1-dimenziós esetben érvényesek. Véges magok esetén még egy-dimenziós modellben is problémát jelent, hogy elérhető-e a stacionaritás legalább az ütközés egy szakaszában, vagy a kezdeti és a végső tranziens jelen-

ségek nem engedik érvényre jutni a stacioner esetre levezetett szabályszerűségeket. E célból az előbbi egy-dimenziós modellben a lökeshullám stacionaritását is megvizsgáltuk (Cs79c). Aszimmetrikus Ne+U ütközést írtunk le és azt kaptuk eredményül, hogy a stacioner áramlás viszonylag gyorsan kialakul a modellben (1–2 fm/c), ezekután addig, míg a nyalábot alkotó Ne mag anyagának befelé áramlása tart, az áramlási kép stacioner, majd a Ne-mag oldalán tágulás indul meg, ami csökkenti a sűrű tartomány nyomását. Ez a hatás aztán arra vezet, hogy a lökeshullám terjedése a céltárgy magban lelassul, és a létrehozott sűrűségnövekedés csökken. A lökeshullám azonban eléri a céltárgymag túlsó szélét és még ott is észrevehető sűrűség, növekedést hoz létre. A maganyag teljes kitágulása és feltörése csak ezt követően megy végbe (10. ábra).



9. ábra. A lökeshullám v_s sebessége, (tömegközépponti rendszerben), és Δl szélessége, az n/n_0 felsűrűsödés és a T hőmérsékletnövekedés a relativisztikus Rankine—Hugoniot-egyenletekből számítva (vonalak), és az egy dimenziós relativisztikus viszkózus hidrodinamikai modell (Cs79a) numerikus megoldásából meghatározva (pontok) különböző nyaláb energiák esetén. A folytonos (szaggatott) vonalak valamint a háromszögek (pontok) rendre az (Am77), ((St78, 79bc)) hivatkozásokból vett állapot-egyenletekhez tartoznak. A numerikus számítások jól egyeznek a Rankine—Hugoniot-egyenletek következményeivel, ami azt jelenti, hogy a lökeshullám stacionernek tekinthető. A lökeshullám kis szélessége annak tudható be, hogy a viszkozitás növekedését megnövekedett hőmérséklet esetén nem vettük figyelembe

A lökeshullám közelítés érvényességét korlátozó másik hatásra a több dimenziós számítások mutattak rá. A nyaláb iránya mentén befelé áramló maganyagnak lehetősége van haránt irányban tágulni. Ennek eredményeként az elért maximális kompresszió még centrális ütközésekben is alatta marad a Rankine—Hugoniot-egyenletek által adottnak (Bu81a).



10. ábra. A sűrűség változása $^{20}\text{Ne} + ^{197}\text{Au}$ ($E_p = 400 \text{ MeV/n}$) reakcióban egy dimenziós relativisztikus viszkózus hidrodinamikai modellben (Cs79c). A folytonos vonalak maganyagsűrűség megadott értékeihez tartoznak, a szaggatottak a folyadékkelemek mozgását mutatják két dimenziós téridőben. A lökéshullámban felsűrűsödött tartományt a legbelső kontúrvo-nal határolja, ahol a sűrűség az kétszeres maganyagsűrűséget meghaladja. Az aszimmetrikus ütközésben a lökéshullám nem végig stacioner, hanem a 10 és 20 fm/c közti időközben észlel-hetően csökken sebessége

5.2 Részecskék kiszóródása a forró tartományból

A hidrodinamikai modell nem tartalmazza azt a lehetőséget, hogy a részecskék egy hányada elhagyhassa a folyadékot kölcsönhatás nélkül. Végtelen anyagban, ahol az átlagos szabad úthossz elhanyagolható a rendszer jellemző méreteihez képest, ez nem is fontos, esetünkben azonban részecskék közvetlen emittálása nem kizárt már a feltörési fázis előtt sem. Így a lökéshullám kialakulását ez a folyamat befolyásolhatja.

A közvetlenül kiszórt részecskéket elméletileg és kísérletileg is sokat vizsgálták (Ta80ab, 81, Sc79c, 81ab, Na80, Kn80, 81, Ha80, Ga80b), a hidrodinamikai modellen belül azonban erre nem nyílt lehetőség. Modellünk érvényességi körének meghatározásához azonban a kiszórás mértékének és hatásának megbecslésére szükség van, és ezért módosításokat vezettünk be a közvetlen kiszórás leírása érdekében.

Minden nukleon nukleon ütközés után a szórt nukleonok bizonyos valószínűséggel elhagyhatják a rendszert. Egységnyi térfogatban és idő-intervallumban az olyan ütközések száma, ahol a szórt nukleonok egyike v_1 sebességű, a következő (Hu63):

$$R = \int d^3 v_2 d\Omega |v_1 - v_2| \sigma(\Omega) f(r, v'_1, t) f(r, v'_2, t), \quad (5.6)$$

ahol $\sigma(\Omega)$ a differenciális hatáskeresztmetszet és f a nukleonok eloszlásfüggvénye. Így az nq' nukleon fluxus egy az r pontban elhelyezkedő n sűrűségű folyadékcélából v_1 irányba az $l(r, v_1, t)$ távolságban levő felületen át:

$$nq'(v_1) d^3 v_1 = R \exp(-l(r, v_1, t)/\lambda(n(r), v_1)) d^3 v_1, \quad (5.7)$$

ahol λ a kiszórási trajektória mentén átlagolt szabad úthossz. Ezáltal a térfogatelem teljes nukleon vesztesége időegység alatt:

$$nq(r) = \int d^3 v_1 d^3 v_2 d\Omega |v_1 - v_2| \sigma(\Omega) f(r, v'_1, t) f(r, v'_2, t) \exp(-l(r, v_1, t)/\lambda(n(r), v_1)). \quad (5.8)$$

Annak érdekében, hogy kvantitatív becslést tudjunk adni a reakció alatt emittált nukleonok számára, a fenti fluxust negatív forrás tagként beillesztettük a korábban ismertetett egy dimenziós modellbe:

$$DN = -N \operatorname{div} v - qN,$$

$$DM = -M \operatorname{div} v - \operatorname{Div} p - qM,$$

$$DE = -E \operatorname{div} v - \operatorname{div}(Pv) - qE. \quad (5.9)$$

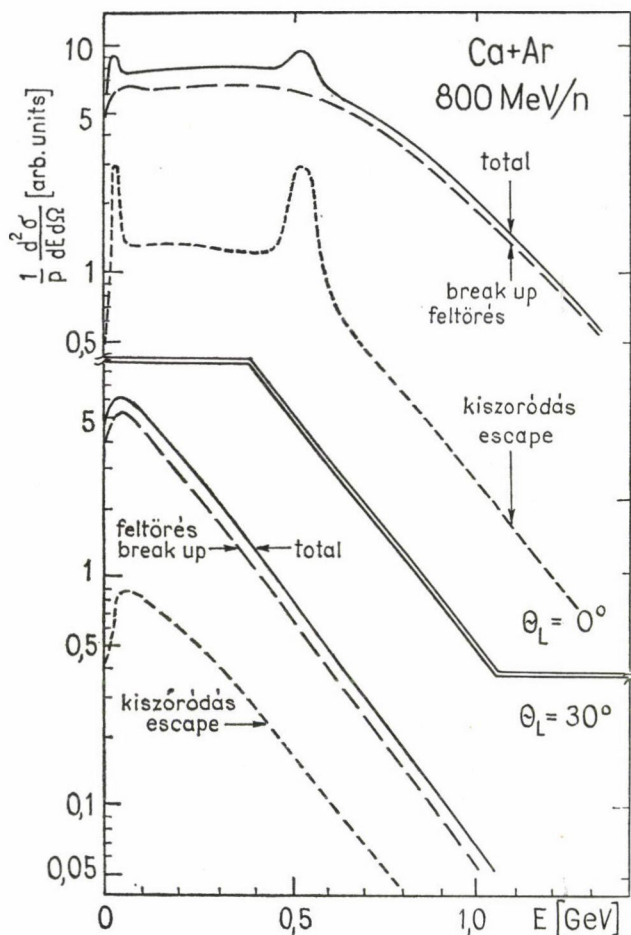
Feltettük, hogy az energia- és impulzusvesztés a nukleonvesztéssel arányos. A fenti egyenletrendszert a már ismertetett módszerrel megoldottuk, és kiszámítottuk a háromszor differenciális nukleon hatáskeresztmetszetet is (Ba81a).

A 11. ábrán a nukleon hatáskeresztmetszet látható Ca+Ar ütközés esetén 800 MeV/nukleon nyaláb energia mellett. Előre mutató szögeknél a nyaláb és a cél-tárgy impulzusának közelében csúcsokat kaptunk, amelyeket a közvetlenül kiszórt nukleonok okoznak.

Ez arra mutat, hogy még mielőtt a folyadékcella teljesen elvesztené kollektív sebességét, a lökéshullámban eléggé felmelegszik ahhoz, hogy észrevehető termikus

kiszórás jöjjön létre. Három-dimenziós számítás esetén a csúcsok természetesen sokkal laposabbak lennének és kísérletileg egyértelműen nem mutathatók ki.

A számítások alapján kvantitatív becslést kaptunk arra, hogy mely esetekben alkalmazhatjuk a hidrodinamikai modellt a kiszórás figyelembevétele nélkül.



11. ábra. Invariáns kétszer differenciális nukleon hatáskeresztmetszet $\text{Ca} + \text{Ar}$ reakcióra 800 MeV/nukleon nyaláberergia esetén lineáris egy dimenziós hidrodinamikai modellből (Ba81a), amely a közvetlen nukleon kiszórást is leírja. Ebben a számításban a nagyobb, $1/n\sigma$ átlagos szabad úthossz kifejezést alkalmaztuk. A pontozott vonal azoknak a nukleonoknak a járulékát mutatja, amelyek a rendszerből a kollektív áramlás során, a feltörés előtt közvetlenül kiszóródtak. A folytonos vonallal ábrázolt hatáskeresztmetszet a feltörés utáni párolgásból származó nukleonokat (szaggatott vonal) is tartalmazza. Az előre szövegnél ($\theta=0^\circ$) észlelhető csúcs a közvetlen kiszórásból ered

2. TÁBLÁZAT

A maganyag feltörése előtt kiszórt nukleonok száma (zárójelben a kiszórt nukleonok száma az össz nukleonszám százalékában)

Reakció	Energia	$\lambda = 1/n\sigma\sqrt{2}$	$\lambda' = 1/n\sigma$
Pb + Pb	400 MeV/nukleon	10,6 (2,5 %)	47,0 (11 %)
Ca + Ar	400 MeV/nukleon	11,2 (14 %)	23,1 (29 %)
Ca + Ar	800 MeV/nukleon	13,3 (17 %)	25,5 (33 %)

A 2. táblázatban az összes kiszórt nukleon számát tüntettük fel különböző reakciók esetén. A táblázatból látható, hogy a kiszórt nukleonok száma nagyon érzékeny a szabad úthossz definíciójára. A második oszlopban felsorolt nagy értékek az általánosan használt de pontatlan szabad úthossz értékből származnak. A szabad úthossz viszonylag pontatlan ismerete ellenére a számítások azt egyértelműen mutatják, hogy nagy rendszerekben, mint pl. Pb + Pb, a hidrodinamikai modellben a kiszórás elhanyagolható. A későbbiekben látni fogjuk, hogy ezt a hidrodinamikai modell és a kísérletek eredményeinek összevetése is igazolja.

6. RÉSZLETES HIDRODINAMIKAI SZÁMÍTÁSOK

A több dimenziós realisztikus hidrodinamikai számítások sokban igazolták a korábbi várakozásokat, amelyek az egyszerű modellekre épültek. A legszembetűnőbb jelenség a lökeshullám kialakulása és terjedése, amely minden hidrodinamikai számításnak sajátja. Az egy-dimenziós modellekben azonban nem lehetett a kísérletekkel valóban összehasonlítható eredményeket nyerni. Mivel a kísérletekben az ütközési paraméter közvetlenül nem határozható meg, olyan leírásra van szükség, amely minden ütközési paraméterre, vagy legalább is az ütközési paraméterek egy tartományára érvényes. Mint már az eddigi elemzések is mutatták, a 3-dimenziós hidrodinamikai leírás, nagy magok centrális és közel centrális ($b < (R_p + R_t)/2$) ütközéseinek leírására alkalmas. Ezekben az ütközésekben nagy számú reakciótermék keletkezik, ami mindaddig az egyetlen lehetőséget nyújtotta kiválasztásukra. Így a kísérletekben külön kiértékeltek az olyan reakciókat, ahol pl. 15-nél több ($M_T > 15$) emittált részecskét észleltek. Az így kiválasztott reakciók a teljes hatáskeresztmetszetnek egy adott százalékát képviselték, és ennek alapján az egyes modellekben az így kiválasztott csoporthoz az ütközési paraméterek egy tartománya hozzárendelhető (pl.: 0–4 fm). Ez a hozzárendelés azonban modellfüggő és a statisztikus fluktuációk miatt a tartomány határa nem adható meg élesen még egy modellen belül sem.

Geometriai okokból azonban nyilvánvaló, hogy a kiválasztott csoportban a legtöbb ütközés paramétere a tartomány felső határa közelébe esik. Így a hidrodinamika szempontjából ideális pontosan centrális ütközés hatáskeresztmetszetének kísérleti meghatározása eddig nem volt lehetséges, és ezért a hidrodinamikai modellben kellett a nemcentrális ütközéseket leírni.

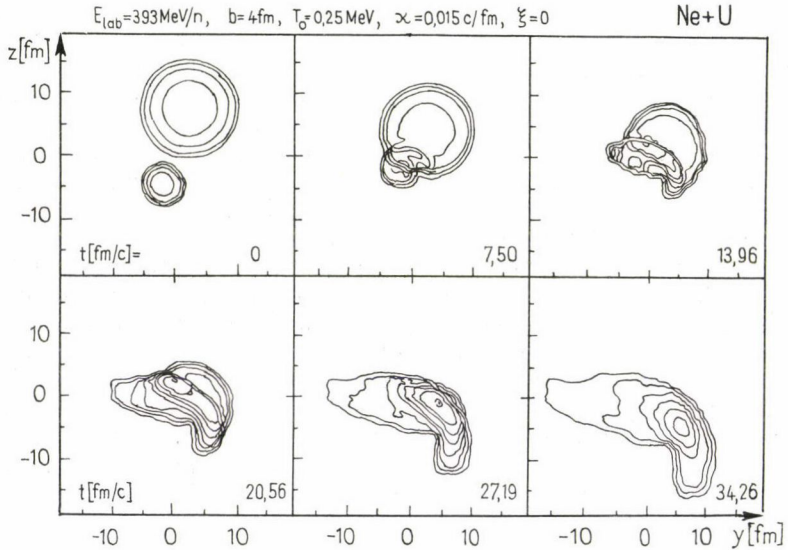
A részletes hidrodinamikai számítások az ilyen ütközések körében is megmutatták, hogy a kollektív folyamatok észlelhető, és más modellekben nem látható következményekre vezetnek.

6.1 A félrecsúszás

A félrecsúszás („bounce-off” vagy „side-splash”) tipikus és lényegében egyszerű hidrodinamikai folyamat: A pontosan centrális ütközésektől eltérően, ahol a maganyag a nyalábra merőlegesen és azimut-szimmetrikusan kipurcolódik, a kis ütközési paramétereknél az azimut-szimmetria megszűnik és az emittált részecskék nagyobb része az ütközési síkban, illetve annak közelében észlelhető. A lökeshullámban felsűrűsödött és felforrósodott középső tartomány a nyaláb és a céltárgy mag szélső, hidegebb részeire nagyobb nyomást gyakorol, s ezek a részek egymással azimutálisan ellentétes irányban, a nyalábra merőlegesen, észlelhető sebességre gyorsulnak fel. A jelenség lényegében a két mag erősen rugalmatlan ütközésként fogható fel, ahol a már szóródott magok az elvesztett kinetikus energia terhére a végső fázisban szétesnek vagy szétrobbannak (feltörés).

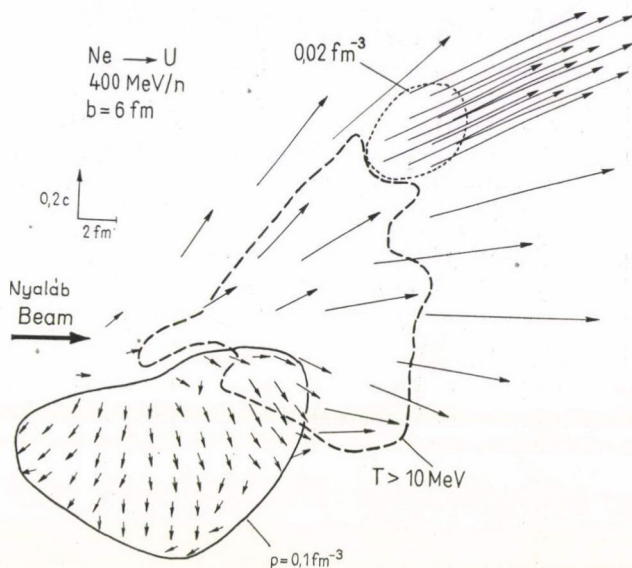
A 12. ábrán a sűrűségeloszlás időbeli változását láthatjuk egy tipikus reakcióban. A lökeshullám kb. 30 fm/c idő alatt éri el a céltárgy mag hátsó felületét, de ezalatt haránt irányban már jól észlelhető tágulás indult meg, különösen a könnyebb nyaláb mag oldalán.

A félrecsúszási folyamatban az ütköző magok nem tartják meg identitásukat, de ennek ellenére a folyamat viszonylag jól jellemezhető a magok tömegközépvonalas



12. ábra. A sűrűség változása a reakciókban Ne+U ütközésben $b=4$ fm ütközési paraméternél, 393 MeV/nukleon nyalábenergia esetén viszkózus hidrodinamikai modellben (Bu81a). A sűrűség szintvonalas ábrázolása 6 különböző időpillanatban látható, a nyaláb mag a z -tengely mentén pozitív irányba (az ábrán függőlegesen felfelé) mozog sebességközépponti rendszerben ábrázolva. 4 szintvonal felel meg a normál magsűrűségnek, a maximális kompresszió több mint kétszeres. Az utolsó három ábrán már jól látható a félrecsúszási folyamat kialakulása

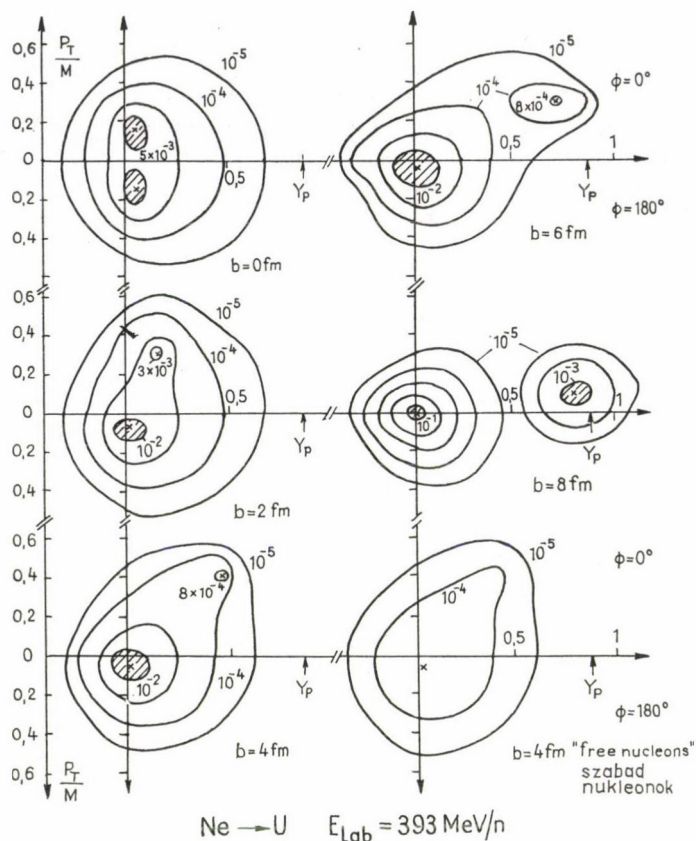
ponti rendszerben történő kollektív inelasztikus ütközésével. Az ilyen jelenség lehetőségére már a legkorábbi (Am75, 77) három-dimenziós hidrodinamikai számításban is rámutattak, de részletesen csak később elemezték (St79bc, 80d). A 13. ábrán (St80d) alapján a végső fázis jellegzetes kollektív áramlási képe, hőmérséklet és sűrűségeloszlása látható. Ebben a munkában több olyan jellegzetes tulajdonságra rámutattak, ami a jelenség észlelését lehetővé teheti, de a munka realizisztikus hatás-keresztmetszet-számítást még nem tartalmazott.



13. ábra. A feltörés pillanatában mérhető sebesség- (nyilak), sűrűség- (vonalak) és hőmérsékleteloszlás (pontok) a reakciósíkban egy 400 MeV/nukleon energiájú Ne + U ütközésben $b=6$ fm ütközési paraméternél (St80d). A középső forró ($T > 10$ MeV) tartomány viszonylag ritkább, míg a sűrűbb céltárgy és nyaláb mag maradványok a hidegebb szélső tartományokba esnek, és jól definiált viszonylag egy-
séges kollektív sebességük van (lab. rendszer)

6.2 A félrecsúszás észlelhető jelei

6.2.1 Szabad és össznukleon hatáskeresztmetszetek. — A fent említett két- (Bu81a) és három-dimenziós (St80d) hidrodinamikai modellekhez hozzáillesztettük a 4. fejezetben ismertetett párolgási modellt, először annak egyszerűbb formájában. Ez lehetővé tette, hogy meghatározzuk a háromszor differenciális nukleon hatáskeresztmetszetet, mind a termikus, mind a hidrodinamikai folyamatok figyelembevételével. Annak ellenére, hogy a termikus sebességkomponens figyelembevétele lényegesen simábbá tette a hatáskeresztmetszetet, a félrecsúszás jelei egyértelműen megfigyelhetők. Az ütközési paramétertől függően a reakciósíkban a 0 szögeloszlásban éles csúcs figyelhető meg a könnyebb nyaláb mag (Ne) félrecsúszásának irányá-



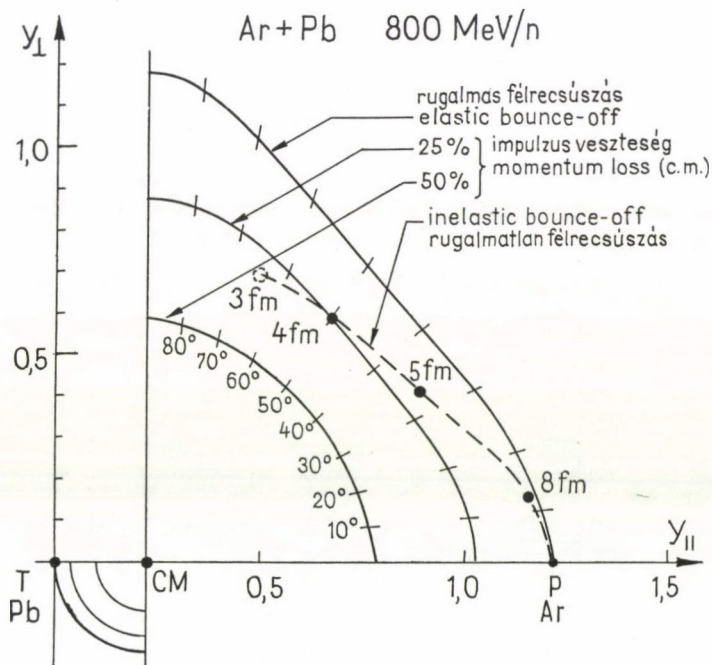
14. ábra. Invariáns háromszor differenciális hatáskeresztmetszet szintvonalas ábrái a rapiditási síkon $\text{Ne} + \text{U}$ (393 MeV/nukleon) a 3-dimenziós hidrodinamikai és párolgási modell szerint (St81a). A hatáskeresztmetszetek reakciósbeli metszeteit ábrázoltuk ($\phi = 0^\circ/180^\circ$) különböző ütközési paraméterek esetén. Az össz-nukleon hatáskeresztmetszetek jól mutatják a kollektív mag-mag kinematikát. Az utolsó ábrapáron a szabad- (free nucleons) és össz-nukleon hatáskeresztmetszetet hasonlítjuk össze, látható, hogy az utóbbi jobban mutatja a mag-mag kinematika szerkezetét. Y_p a nyaláb rapiditását mutatja, a nyaláb mag párolgásából eredő csúcshoz ettől a ponttól való eltérése b csökkentésekor növekszik. Az eltérülés szöge és az energiavesztés a csúcs helyzetéből leolvasható

ban. Ez a csúcs különösen magasabb energiákon éles (14. ábra).* Az ütközési paraméter növekedésével a félrecsúszási szög csökken (15. ábra), és perifériális ütkö-

* Az invariáns hatáskeresztmetszet rapiditás ($y_{11} = \text{arc th}(v/c)$, $y_T = p_T/m$) változók szerinti megadása azzal az előnnyel jár, hogy nyaláb irányú Lorentz-transzformáció esetén a hatáskeresztmetszet egyszerűen csak eltolandó az y_{11} tengely mentén $\text{arc th}(V_{\text{boost}}/c)$ -vel (az eloszlások és a rapiditás Lorentz-transzformációjának szabályai (By73) miatt).

zéseknél a hatáskeresztmetszet előre csúcsossá válik. Ez az oka annak, hogy inkluzív hatáskeresztmetszetekben, ahol a nagy ütközési paraméterek a dominánsak, a félrecsúszás észlelése nem várható. Itt megjegyzendő, hogy a kaszkád modellek kis, sőt nulla ütközési paraméter mellett is előre csúcsos hatáskeresztmetszetet adnak. A 14. ábrán egy esetben a szabad és össznukleon hatáskeresztmetszetet is összehasonlítottuk, és látható, hogy az össznukleon hatáskeresztmetszetben a félrecsúszási csúcs élesebb. Ez azt jelenti, hogy nehezebb emittált részecskék a kollektív félrecsúszási effektust jobban megmutatják. A különbség okaira még visszatérünk.

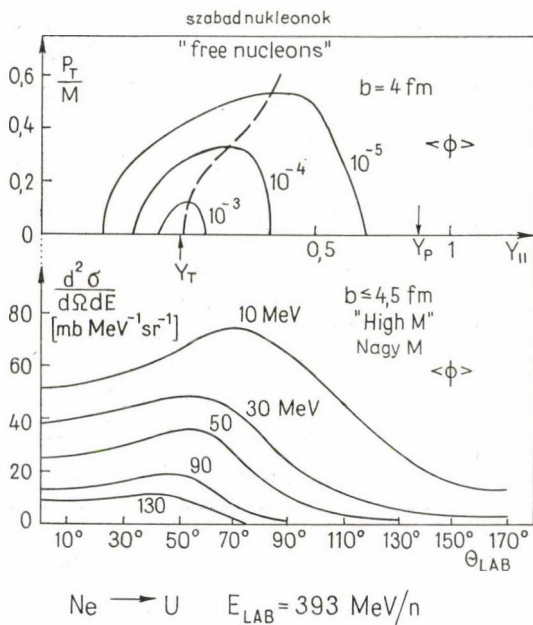
Az eddigiekben ismertetett háromszor differenciális hatáskeresztmetszetek kísérleti meghatározása azonban csak az 1982-es év során várható a nemrég üzembe helyezett „plastic-ball” és „plastic-wall” detektorral. A háromszor differenciális hatáskeresztmetszet meghatározásához ugyanis a reakciósíkot először azonosítani kell, és az azimut-függés csak ezután határozható meg. A reakciósík azonosításához sokszoros koincidenciák mérése szükséges.



15. ábra. A kollektív kinematika bemutatása Ar+Pb (800 MeV/n.) reakció esetén a rapiditási síkon. A fekete pontok a jelzett ütközési paraméterek esetén a nyalábmag párolgása által létrehozott csúcs helyzetét mutatják. A legkülső görbe (elastic bounce-off) a magok tömegközépponti rendszerében (CM) történt rugalmas ütközés lehetséges végállapotait mutatják, a belső görbék különböző (25%, 50%) tömegközépponti rendszerbeli impulzusvesztést jelölnek. A szaggatott vonal a 3-dimenziós hidrodinamikai modellben (Cs81e) szögeltérést és energiavesztést mutatja. Csökkenő ütközési paraméternél a félrecsúszási folyamat egyre rugalmatlanabbá válik

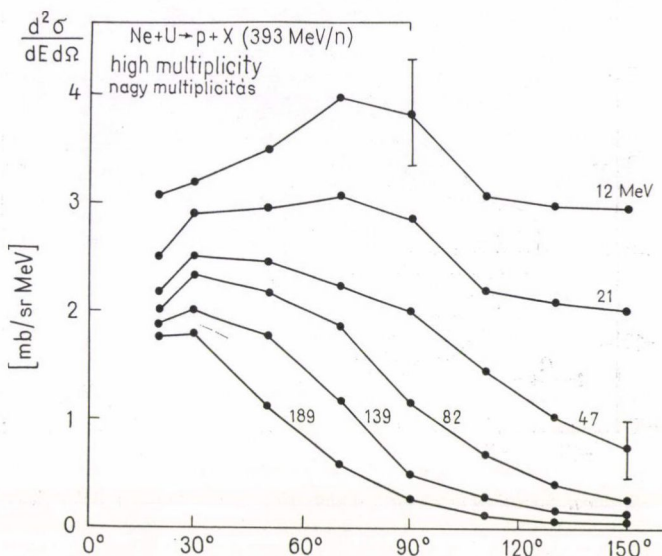
Így a kísérletekkel való összehasonlíthatóság miatt meg kellett határoznunk a kétszer differenciális hatáskeresztmetszetet is. Ez, az azimut szögére való átlagolással és a különböző ütközési paraméterekre való integrálással kapható meg. Ha a 14. ábrára tekintünk, megállapítható, hogy ez az eljárás a hatáskeresztmetszet szerkezetének majdnem teljes elvesztésével jár, és közel gömb-szimmetrikus hatáskeresztmetszetet kapunk. Ez magyarázza a „fireball” modell (We76) sikerét. Ha azonban csak a nagy multiplicitású ütközések hatáskeresztmetszetét akarjuk meghatározni, akkor csak egy adott (pl. 4 fm) ütközési paraméterig kell integrálnunk, és így van remény arra, hogy a félrecsúszási folyamat jeleit még az azimutra való átlagolás után is észleljük.

A 16. ábrán a nagy multiplicitású események kétszer differenciális hatáskeresztmetszete látható a rapiditás síkon ($b=4$ fm) és a polárszög függvényében. A kísérleti hatáskeresztmetszettel (St80c) összehasonlítva (17. ábra) az egyezés meggyőző, és figyelembe véve, hogy a hatáskeresztmetszet szögfüggését csak a hidrodinamikai modell reprodukálja, ez az eredmény a hidrodinamikai modell érvényessége első komoly bizonyítékának tekintendő. (Megjegyzendő, hogy egy korábbi kísérletben Ba79, Sc78) alfa részecskék szögeloszlásának vizsgálata már hasonló eredményre



16. ábra. Azimutszögére átlagolt és ütközési paraméterre integrált hatáskeresztmetszet a 14. ábrán bemutatott számításból (alsó ábra). A görbék paramétere a nukleon-energia. A felső ábrán ugyanez a hatáskeresztmetszet van ábrázolva $b=4$ fm ütközési paraméter esetén. A hatáskeresztmetszetek jellegzetes vonása a $\theta=50^\circ-70^\circ$ polárszög körüli maximum, amit a kísérletekben is megfigyeltek (St80a) (l. 17. ábra), és amelyet egyedül a hidrodinamikai modellben tapasztalunk

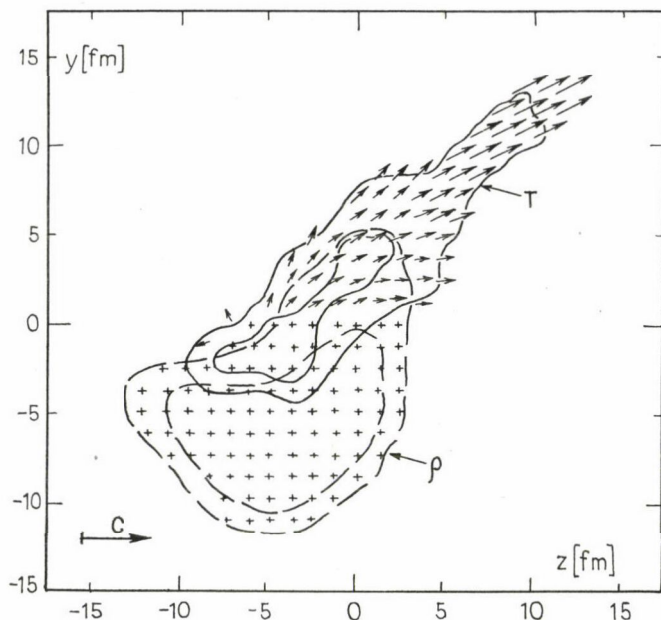
vezetett, de a viszonylag rossz statisztika miatt ezt nem tekintették bizonyító erejűnek.) A kísérlettel való jó egyezést az is aláhúzza, hogy a hatáskeresztmetszet szög-eloszlásában észlelt csúcs a protonenergia növekedése esetén élesebb lesz, és a kisebb polárszögek irányába tolódik el, mind a hidrodinamikai modellben, mind a kísérletben.



17. ábra. Kétszer differenciális proton hatáskeresztmetszet $\text{Ne} + \text{U}$ (393 MeV/n.) kísérletből (St80a) nagy multiplicitású ($M > 15$) eseményekre. A hatáskeresztmetszet viselkedése hasonlít a hidrodinamikai modellben kapotthoz, a normalizációbeli különbséget a modellbeli túl nagy ($b = 0 - 4,4$ fm) integrálási tartomány okozza

6.2.2 Kis mag hatáskeresztmetszetek. — A közeljövőben tervezett kísérletekben nemcsak proton, hanem d , t , ^3He és ^4He részecskék háromszor differenciális hatáskeresztmetszetének meghatározását is tervezik. Ezért a hidrodinamikai modellben megbecsültük, mennyire érzékenyek ezek a mérések a kollektív folyamatokra, és meghatároztuk hatáskeresztmetszetüket a 4.2.2 pontban leírt módon (8. ábra). A kémiai egyensúly feltevése arra vezet, hogy a szélső, hidegebb tartományokban főleg nehezebb részecskék keletkeznek, és mivel ezekben a tartományokban a legnagyobb a kollektív félrecsúszási sebesség, a félrecsúszás a nehezebb részecskénél jobban megmutatkozik (18., 19. ábra). Ehhez jön még az a hatás is, hogy termikus egyensúlyban a nehezebb részecskék termikus sebessége kisebb, mint a könnyűeké, és így a kollektív jelleget kevésbé simítja el. A protonok pont ellenkezőleg, a központi forró zónában keletkeznek túlnyomó részben, és így az ottani magasabb hőmérséklet, kisebb folyási sebességek és kisebb tömegük hatására a kollektív folyamatokat kevésbé tükrözik.

A jelenlegi előzetes kísérleti eredmények az összetett részecskék hatáskeresztmetszetéről (Wo80a) alátámasztják ezeket a várakozásokat. A fentiek alapján az is

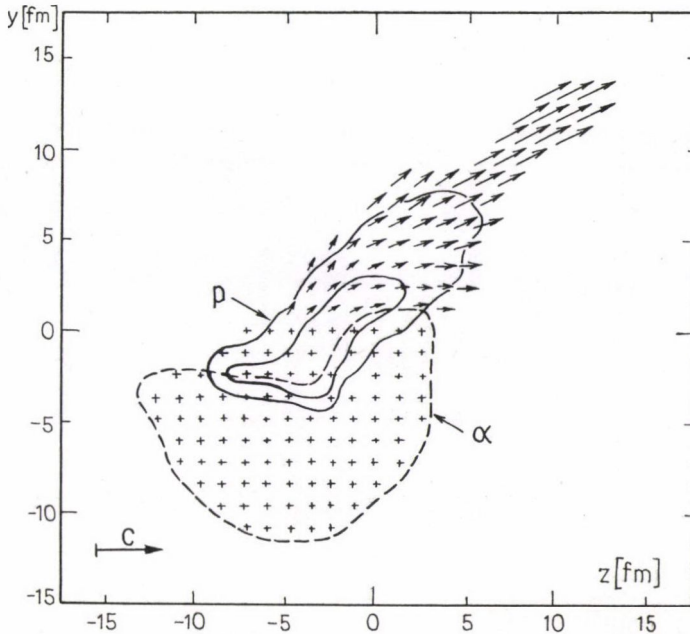


18. ábra. Sűrűség- (ρ) hőmérséklet- (T) és sebesség (nyilak) eloszlás a reakciókban 3-dimenziós viszkózus hidrodinamikai modellből (Gr81b), $\text{Ne} + \text{U}$ (393 MeV/n.) reakcióra ($b=6$ fm) lab. rendszerben a feltörés pillanatában ($t=34$ fm/c). A keresztek azt jelölik, hogy az adott folyadékcselemben az áramlási sebesség $v < 0,1c$. A nyílak a z -tengely mentén pozitív irányú és a Ne mag az ábra felső felén (pozitív y -irányban) helyezkedett el. A hőmérsékleti szintvonalak $T=10, 20$ MeV hőmérsékletéhez, a sűrűségi (szaggatott) szintvonalak $\rho=0,05, 0,1/\text{fm}^3$ sűrűséghez tartoznak

érthető, hogy először miért az alfa részecskék hatáskeresztmetszetében észlelték (Sc78, Ba79) a félrecsúzás jeleit. Az alfa részecskék különös szerepét növeli a 4.2.1 pontban említett Bose-kondenzáció lehetősége. Ennek kísérleti bizonyításához azonban a hasonló tömegű Fermionok (pl. ^3He) hatáskeresztmetszetével való igen pontos összehasonlítás szükséges.

6.3 Korrelációs vizsgálatok

6.3.1 Két proton korreláció. — Nagamiya, Tanihata és munkatársaik (Na80, 81a, Ta80ab, 81, Cs81e) a kvázi-elasztikus nukleon-nukleon ütközés kimutatása céljából számos nyaláb, céltárgy mag kombinációra elvégeztek egy érdekes korrelációs kísérletet. Négy egymásra azimutálisan merőleges irányban elhelyezett detektort használtak ($S: \varphi=0^\circ$, $U: \varphi=90^\circ$, $R: \varphi=180^\circ$, $D: \varphi=270^\circ$), amelyek közül az S spektrométer polár-szöge változtatható volt, a többi három teleszkópé pedig a $\theta=40^\circ$ -nál rögzített. Az utóbbi három teleszkóp csak $E_p=200$ MeV energiaküszöb felett detek-



19. ábra. A protonok és alfa részecskék sűrűségeloszlása a feltörés után a reakciókban a 18. ábrán közölt esetben a feltöréskor kémiai egyensúlyt feltételező párolgási modellből. A középső forró tartományban az anyag főleg protonokra esik szét, míg a szélső hidegebb, sűrűbb régiókban inkább nehezebb alfa részecskék keletkeznek. Ezen utóbbiak a kollektív áramlási sebességet jobban mutatják, ui. alacsonyabb hőmérsékletű tartományokból származnak és termikus sebességük nagyobb tömegük miatt különben is kisebb. A szaggatott vonal (α) $n_\alpha = 0,005/\text{fm}^3$ alfa részecske sűrűséghez a folytonos szintvonalak (p) $n_p = 0,003$, $0,006/\text{fm}^3$ proton sűrűséghez tartoznak

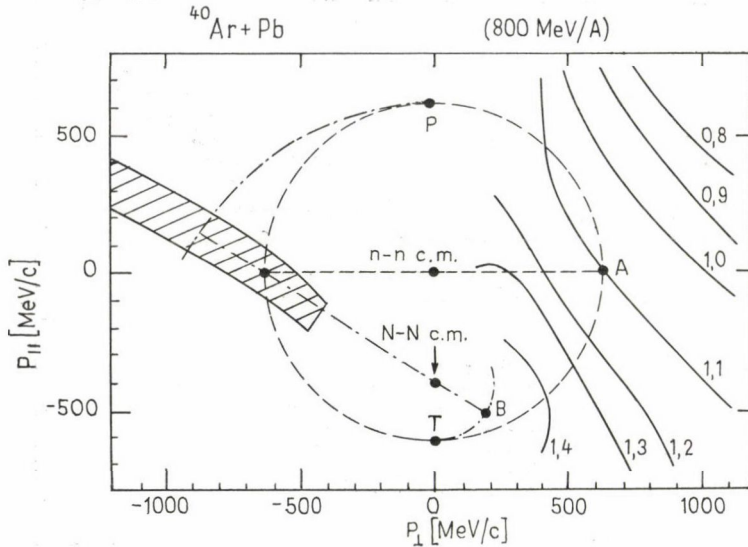
tálta a részecskéket. Az (S, U) , (S, D) és (S, R) koincidenciákat mérték, és ezek segítségével meghatározták a

$$C(y_{||}, y_T) = ((S, R)/R)/((S, U)/U + (S, D)/D) \quad (6.1)$$

korrelációs függvényt, ahol a függvény argumentuma az S spektrométer által mért proton rapiditása.

A C korrelációs függvény viselkedéséből $C+C$ és $\text{Ar}+\text{KCl}$ reakciókban kimutatták a kvázi-rugalmas nukleon-nukleon kiszórást, és ezt az eredményt a lineáris kaszkád modellben (Kn79ab, 80) sikerült kvantitatíven is reprodukálni (Kn81). Nagyobb rendszerek ($C+\text{Pb}$, $\text{Ar}+\text{Pb}$) esetén azonban a korrelációs függvény teljesen új viselkedést mutatott, amit a lineáris kaszkád modellben nem lehetett megmagyarázni.

Mint rámutattunk (Cs81a), egy egyszerű „bounce-off” modellben a minőségileg új viselkedést a kollektív hidrodinamikai folyamatok túlsúlyba jutása okozza. A hidrodinamikai modellben ugyan (a statisztikus egyensúly feltevése miatt) nem veszünk tekintetbe mikroszkopikus nukleon-nukleon korrelációkat, de a félrecsúszási folya-



20. ábra. A két proton korrelációs kísérlet kinematikai alapjai momentumtérben az ütközési síkban Ar + Pb (800 MeV/n.) reakció példáján bemutatva. A T és P pontok rendre a céltárgy és a nyaláb mag impulzusát jelzik az ütközés előtt. A rovátkált terület az ábra bal oldalán az R , (U , D) teleszkópok detektálási tartományát jelzi. Az S spektrométer az R teleszkóppal szemben helyezkedik el (itt az ábra jobb oldalán) és ott méri az energia és szögeloszlást, így az egész jobb oldali impulzustartomány feltérképezését lehetővé teszi. Nukleon-nukleon rugalmas ütközés esetén a szórt nukleonok a nukleon-nukleon tömegközéppont ($n-n$ c.m.) körüli gömbre esnek egymással szemben, s így ha egyiküket az R teleszkóp észleli, akkor a párját a spektrométer az A pontban detektálja. Ekkor a C korrelációs függvénynek itt kell, hogy maximuma legyen. Mag-mag ütközés esetén a magok párolgásából származó nukleonok a szórás után a magok tömegközéppontja ($N-N$ c.m.) körüli gömbön helyezkednek el. Ekkor a B pont körül várhatjuk a C fv. maximumát. Az ábra folytonos görbéi a C fv. szintvonalai a kísérletből (Ta80a)

mat maga végeredményben, mint láttuk, erős 180° -os azimutális korrelációt hoz létre az emittált részecskék között. Aszimmetrikus ütközésekben azonban ennek a korrelációnak teta és energiafüggése erősen eltér a kvázi elasztikus nukleon nukleon ütközésektől (20. ábra). A kollektív folyamatban ugyanis a mag-mag közötti rugalmatlan ütközés kinematikája dominál.

A C korrelációs függvényt később részletesen kiszámítottuk a háromdimenziós hidrodinamikai modellben is (Cs81be). A koincidenciákat a háromszor differenciális hatáskeresztmetszetből a következőképpen kaptuk meg:

$$(S(y_{||}, p_T/m) \cdot U) = \int \tau_p(40^\circ, \Phi, \varepsilon > 200 \text{ MeV}, b) \sigma_p(y_{||}, p_T/m, \Phi + \delta, b) d\Phi d\varepsilon db, \quad (6.2)$$

ahol az (S, R) koincidencia esetén a $\delta = 180^\circ$ (az U és D esetben pedig $\delta = 90^\circ$, 270°). Az $R(U, D)$ beütésszám értéke pedig:

$$R = U = D = \int \sigma_p(40^\circ, \Phi, \varepsilon > 200 \text{ MeV}, b) d\Phi d\varepsilon db.$$

Az így kapott C korrelációs függvénynek maximuma van ($C > 1$) annál a rapiditásnál, ahol a legtöbb részecskét észlelhetjük az R teleszkóppal azimutálisan antikorreálcióban.

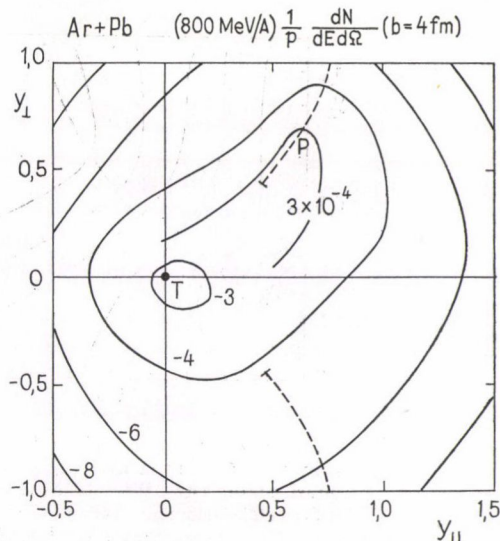
A hidrodinamikai modellben kapott korrelációs függvény (18. ábra) jól egyezik a kísérlettel (23. ábra). A nulla rapiditás körüli maximum a céltárgymag párolgásának eredménye, mivel ez antikorreál azimutálisan az R teleszkóp által detektált nyaláb-mag párolgásából eredő részecskékkal. A teleszkóp energiaküszöbe miatt ugyanis majdnem kizárólag csak a nyaláb-mag párolgásából eredő részecskéket detektálhatja, és ezek közül is csak azokat, amelyek 4 fm körüli ütközési paraméterhez tartozó ütközésben keletkeztek (a teleszkóp $\theta = 40^\circ$ -os elhelyezése miatt, 23. ábra). A kísérleti görbék valamivel magasabban fekszenek ugyan, de a kísérlet normalizálási hibahatárán belül (kb. 20%) vannak. A teleszkópok közötti kis különbségek ugyanis a C normalizálásának bizonytalanságához vezetnek.

A fenti kísérlet a hidrodinamikai modell érvényességének további kísérleti bizonyítéka. Különösen fontos, hogy ez a kísérlet megmutatja az átmenetet a mikroszkopikus és a kollektív folyamatok szerepének megváltozásában, amint a rendszer tömegszáma növekszik.

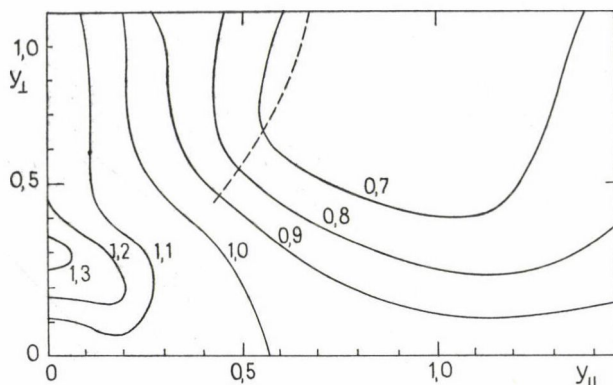
6.3.2 Korreláció lassú nehéz és gyors könnyű részecskék közt. — Egy nemrég elvégzett kísérletben (Me80) lassú nehéz és gyors könnyű részecskék egymás közti azimutális korrelációját vizsgálták, és erős 180° -os korrelációt tapasztaltak, ami további bizonyítékát adja a kollektív folyamatok létének.

A három-dimenziós hidrodinamikai és a könnyű részecskék közt kémiai egyensúlyt feltételező párolgási modellben ezért kiszámítottuk a p és ^4He közti korrelációs függvényt:

$$R(\delta) = \frac{2 \int \sigma_{^4\text{He}}(90^\circ, \varphi, \varepsilon) \sigma_p(40^\circ, \varphi + \delta, 30-40 \text{ MeV}) d\varphi d\varepsilon}{\int \sigma_{^4\text{He}}(90^\circ, \varphi, \varepsilon) d\varphi d\varepsilon \int \sigma_p(40^\circ, \varphi, 30-40 \text{ MeV}) d\varphi} - 1, \quad (6.3)$$

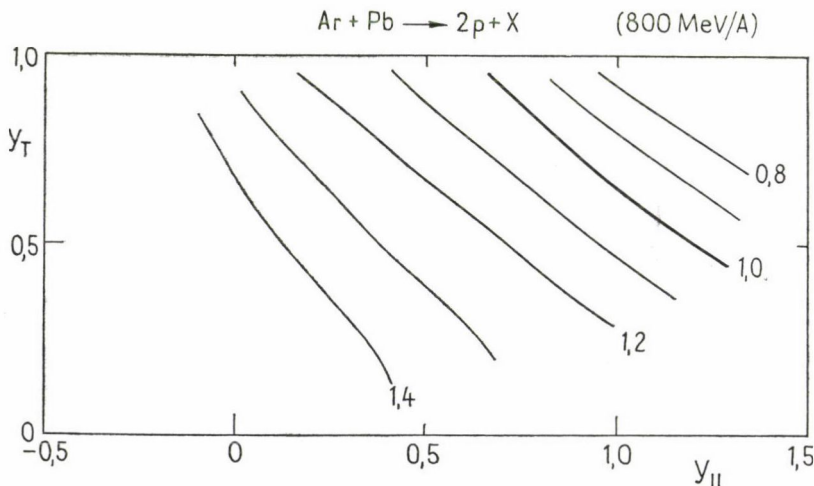


21. ábra. Három dimenziós hidrodinamikai modellben (Cs81e) számított invariáns háromszor differenciális proton hatáskeresztmetszet szintvonalas ábrája (1/Mev.sr egységben) a rapiditás síkon Ar+Pb (800 MeV/n.) reakcióra ($b=4$ fm) a reakciókban. A szaggatott vonalak a teleszkópok érzékenységi tartományát jelzik. A T pont a céltárgy a P a nyaláb mag párolgásából eredő csúcs helyét jelzi. Ez az ábra mutatja, hogy a teleszkópok alig észlelhetik a céltárgy mag párolgásából eredő nukleonokat, viszont a pont feléjük irányuló félrecsúszás esetén a nyaláb mag párolgásából eredő járulékok majdnem 2 nagyságrenddel nagyobbak. Látható, hogy ezért a teleszkópok kizárólag a nyaláb mag párolgására érzékenyek és erre is csak a $b=4-1,5$ fm ütközési paraméter tartományban. Más b esetén a félrecsúszás nem a teleszkópok irányába történik (l. 15. ábra)

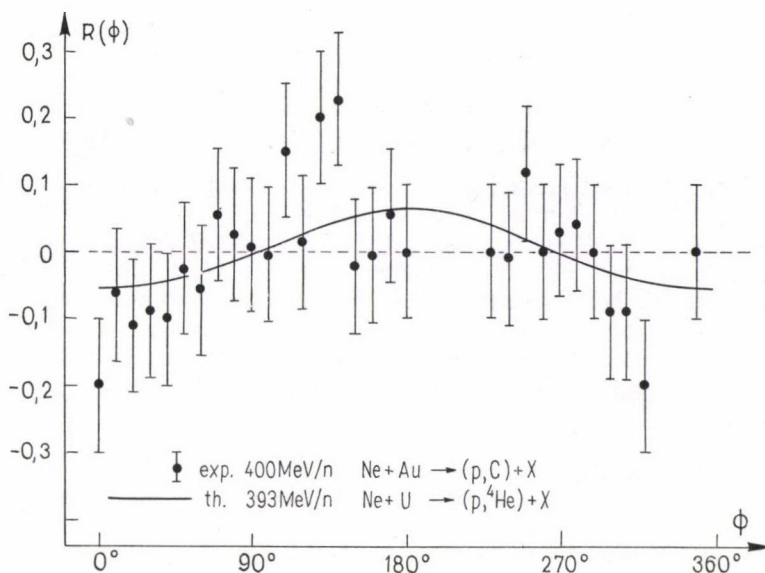


22. ábra. Három dimenziós hidrodinamikai modellben (Cs81e) számított C korrelációs függvény szintvonalas ábrája a rapiditási síkon (Ar + Pb, 800 MeV/n.). Az $y_T=0$ tengelyen a C fv. értéke definíció szerint $C=1,0$. A maximum a céltárgy mag rapiditása közelében jelentkezik

ahol a „nehéz” alfa részecskét a lab. rendszerben $\theta=90^\circ$ -nál, a vele koincidenzában mért protont pedig a $\theta=40^\circ$ -nál a 30–40 MeV közti energiatartományban detektálták. A számítások eredményeként kapott R korrelációs függvény (24. ábra) kvalitatívan jól egyezik a kísérlettel, ami szintén a félrecsúszási folyamat érvényre jutásának következménye (Cs80c, 81d).



23. ábra. Ar + Pb (800 MeV/n.) reakcióban mért (Cs81e) C korrelációs függvény szintvonalas ábrája a rapiditási síkon. A mérés normalizálási hibája kb. 20%-ra tehető



24. ábra. Az $R(\phi)$ azimut korrelációs függvény egy $\theta=90^\circ$ -os polárszögnél detektált nehéz részecske és egy $\theta=40^\circ$ -os polárszögnél 30–40 MeV energiatarományban detektált proton között. A pontok Ne+Au (400 MeV/n.) reakcióban mért értékek (Me80) ahol a nehéz részecske ^{12}C volt. A folytonos vonal a 3-dimenziós hidrodinamikai és a feltöréskor kémiai egyensúlyt feltételező párolgási modellben számított $R(\phi)$ függvényt jelöli Ne+U (393 MeV/n.) reakció esetén. A párolgási modellben a legnehezebb számításba vett részecske a ^4He , ezért a korrelációt ezzel képeztük. A $\phi=180^\circ$ -nál észlelt korreláció a félrecsúszási folyamat következménye: A nehéz részecskék főleg a hidegebb céltárgy mag tartományából erednek, míg a protonok az azimutálisan átellenes oldali melegebb tartományból (l. a 19. ábrát)

7. FÁZISÁTALAKULÁSOK HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA

A 2. fejezetben már röviden említettük, hogy az itt bemutatott vizsgálatokat az teszi igazán érdekessé, hogy a relativisztikus nehéz ion reakciókban a maganyagban végbemenő fázisátalakulások észlelését várjuk.

7.1 Fázisátalakulások a hidrodinamikában

7.1.1 Gyors fázisátalakulás. — A makroszkopikus folyadékokban a fázisátalakulásra vezető folyamatok általában olyan gyorsak az áramlás dinamikájához képest, hogy a fázisok, amikor az lehetséges, azonnal kialakulnak és buborékok vagy cseppek formájában szétválnak. A két fázis közti állandó dinamikus egyensúlyt ekkor az intenzív termodinamikai paraméterek (3.9) azonossága biztosítja. Ezeket

mindkét fázisban külön-külön meghatározhatjuk:

$$\begin{aligned}\mu_1(n_1, S_1) &= \mu_2(n_2, S_2), \\ p_1(n_1, S_1) &= p_2(n_2, S_2), \\ T_1(n_1, S_1) &= T_2(n_2, S_2).\end{aligned}\tag{7.1}$$

Az egyensúlyban levő két fázist jellemző n_1, S_1, n_2 és S_2 paraméterek közül (7.1) hármát rögzít, és így pl. adott n_1 esetén megadható, hogy melyek a vele egyensúlyt tartó másik fázis jellemzői. Az egymással egyensúlyban levő fázisok az (n, S) síkon két görbén helyezkednek el. Ezek általában (van der Waals típusú fázisátmenet esetén) egy adott T_c hőmérsékletnél összeérnek, és magasabb hőmérsékleten a két fázis nem különböztethető meg. Ebben az esetben az (n, S) síkon a két görbe által határolt területen belüli pontok keverékállapotot jelölnek, amely a görbén fekvő pontokkal jellemezhető két fázisból áll össze. Ebben a tartományban ez egyfázisú anyag metastabil vagy instabil egyensúlyi állapotban van.

Az ilyen fázisátmenet leírása a hidrodinamikai modellben nem triviális. Ha a (2.4) vagy (2.5) egyenletrendszer oldjuk meg, akkor adott $n(r, t)$ és $e(r, t)$ esetén meg kell határoznunk a nyomást és hőmérsékletet, ami minden esetben a (7.1) egyenletrendszer megoldását kívánja meg. Ez igen komplikált feladat. A másik lehetőség közvetlen egyenlet levezetése az entrópiatermelésre az (5.5) egyenlethez hasonlóan. Megmutattuk, hogy ilyen egyenlet levezetése lehetséges (Lu79), azonban egy újabb változó is megjelenik, a kialakuló új fázis sűrűsége. Mivel a fázisátalakulás is változtatja a rendszer entrópiáját, végül négy csatolt egyenletet nyerhetünk a fázisok parciális sűrűségének változására és a S_1 , valamint az S_2 fajlagos entrópia változására. Az egyenletek igen bonyolultak és a $q(n, S)$ állapotegyenlet másodrendű deriváltjait is tartalmazzák.

A fenti nehézségek miatt a fázisátalakulás lehetőségének ezt a módját még egydimenziós hidrodinamikai számításokban sem vették eddig figyelembe.

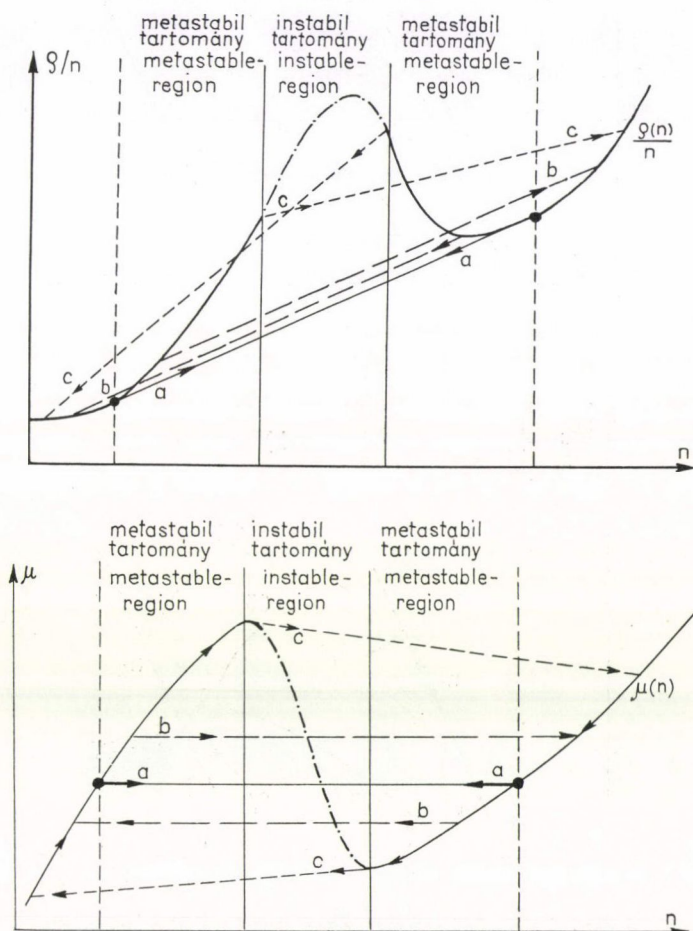
7.1.2 Lassú fázisátalakulás. — Még a makroszkopikus rendszerekben is van arra lehetőség, hogy a rendszer ne kövesse a fenti Maxwell-szabályt, hanem például túlhevítsünk (vagy hűtsünk) egy folyadékot metastabil állapotba, ha meggátoljuk a gőzbuborékok (vagy jégkristályok) kialakulását. Ez csak a $q(n, s)$ állapotegyenlet azon instabil tartományában nem érhető el, ahol a

$$M_{ik} = \partial^2 q / \partial i \partial k, \quad i, k = s, n \tag{7.3}$$

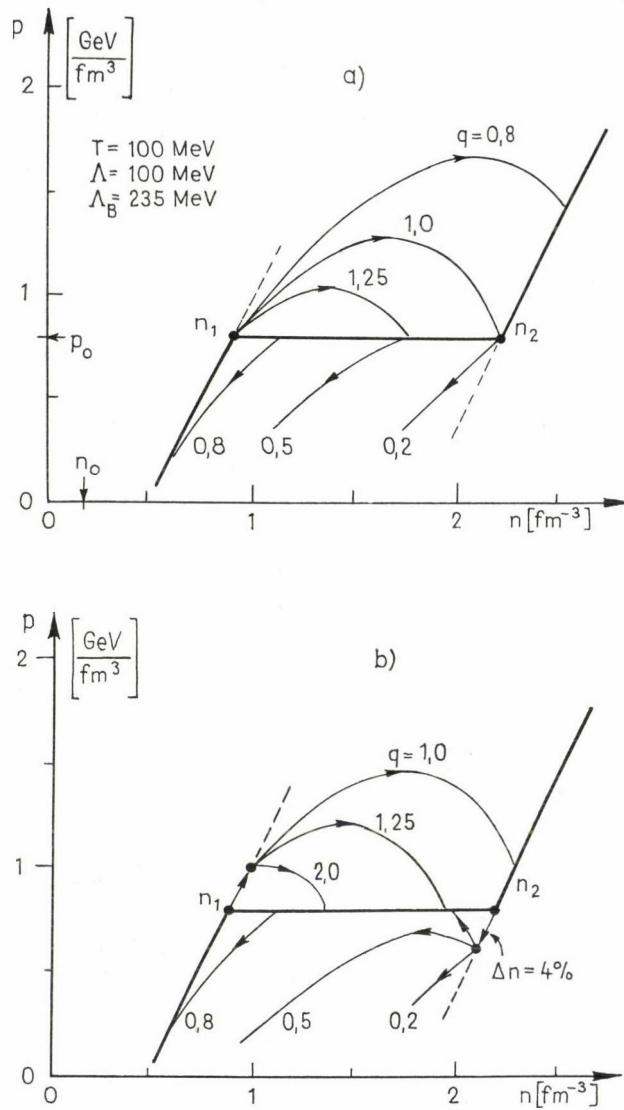
mátrix nem pozitív definit (Lu79). Ennek a feltételnek következménye az a jobban ismert stabilitási feltétel, hogy a nyomás sűrűség szerinti deriváltjának pozitívnak kell lennie.

A magreakciók során azonban a helyzet nem ilyen egyértelmű, mégpedig két okból: A reakció sebessége valószínűleg összemérhető a fázisátalakulás sebességével, másrészt a magok mérete kicsiny, és így ha két fázis ki is alakul, az őket elválasztó felület figyelembevételétől valószínűleg nem lehet eltekinteni. (A makroszkopikus esetekben a fázisok közti felület a nagy térfogatok mellett elhanyagolható, a felület energiája, részecskéinek száma stb. kicsiny az egész rendszeréhez képest.) Ahhoz, hogy a felmerült kérdésekre ténylegesen választ adhassunk a fázisátalakulások dinamikájának mikroszkopikus, kvantummechanikai tanulmányozására lenne szükség elsősorban. Ilyen vizsgálatok azonban még nem állnak rendelkezésünkre.

A viszonylag kevés felhasználható ismeret ellenére felhívtuk a figyelmet néhány érdekes lehetőségre (Lu79). Ha a fázisátalakulás sebessége lassú a rendszer egy fázisban maradhat a metastabil tartományban is. Az instabilitás határának elérésekor (vagy a mikroszkopikus folyamatok által megszabott helyen) az új fázis kialakulhat. Ennek termodinamikai paramétereit a Rankine—Hugoniot-egyenletek határozzák meg. (25. ábra.) Az ilyen egyensúlyi termodinamikával nem leírható folyamatok erősen befolyásolhatják az ütközési folyamat lezajlását. Feltételezhető, hogy a csak



25. ábra. A fázisátmenet lehetséges módjai. A felső ábrán a fajlagos energiasűrűség, az alsón a kémiai potenciál látható az n sűrűség függvényében. Az (a) trajektória a Maxwell-konstrukció szerinti átmenetet jelöli, ami a gyors fázisátalakulás esetén jöhet létre. Ha az áramlás gyorsabb a rendszer a metastabil tartományba is bejuthat (b görbe) egészen az instabil tartomány határáig (c görbe). Termodinamikai egyensúlyban a rendszer az instabil tartományban (ahol $\partial\mu/\partial n < 0$) nem lehet



26. ábra. Lassú fázisátmenet során bejárt trajektóriák a $P(n)$ diagrammon a fázisátalakulás V_F és az áramlás V_H sebességeinek különböző $q = V_F/V_H$ aránya esetén. A vastag folytonos vonal $T = 100 \text{ MeV}$ hőmérséklethez tartozó izoterma a mag anyag és a kvark anyag közti fázisátalakulás tartományában. Az állapotegyenletet a (Ku80) hivatkozásból vettük az ábrán jelzett paraméterekkel. Feltételeztük, hogy az elasztikus ütközések minden pillanatban biztosítják a nyomásegyensúlyt a fázisok között. A (B) ábra 4%-os túlsűrűsödés/ritkulás feltételezésével az (A) e nélkül ábrázolja az átmenetet

rugalmas ütközéseket megkívánó nyomás- és hőmérséklet-kiegyenlítődéssel létrejöhet a rendszerben, míg a fázisegyensúly nem. Ha a fázisegyensúly létrejöttéhez szükséges mikroszkopikus folyamat $v_F = (V \cdot (n_2 + n_1))^{-1} \partial N_{F2} / \partial t$ sebessége összehasonlítható a hidrodinamikai felsűrűsödés $v_H = 1/\Delta n \partial n / \partial t$ sebességével, a rendszer a felsűrűsödés és a tágulás során különböző utakat jár be, ami látens hő felszabadulásával jár együtt. Ennek illusztrálására egy fázisátmenetet tartalmazó állapotegyenlet példáján (Ku80) a 26. ábrán bemutatjuk a különböző relatív sebességeknél ($q = v_F/v_H$) a rendszer által izoterm folyamatban a (p, n) diagramon bejárt utakat. A felszabaduló látens hő azonos sebességek esetén kb. 50 MeV/n.-t tesz ki, ami már esetleg lehetővé teszi ilyen folyamatok kimutatását. Kísérleti indikációk vannak arra, hogy egyes reakciókban a várakozásnál lényegesen nagyobb a termalizáció foka (Ba81c).

7.2 A fázisátalakulás jelei a hatáskeresztmetszetben

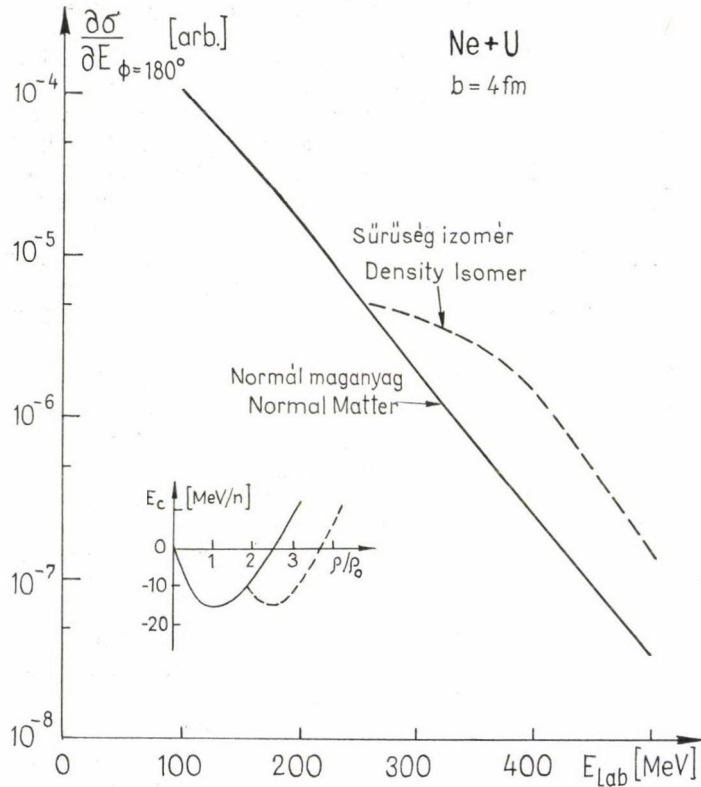
7.2.1 A fázisátalakulás figyelembevétele. — Az eddig végrehajtott hidrodinamikai modell számításokban (Bu81c, Ni81) azzal a feltevessel éltünk, hogy a folyamat dinamikája igen gyors és a rendszer a metastabil, sőt az egyensúlyi termodinamika szerint instabil tartományokban is követi az állapotegyenlet által előírt viselkedést. Nix és Strottman (Ni81) számításaikban fázisátalakulás nélküli de különböző K inkompresszibilitáshoz ($K=200, 400$ MeV) tartozó és egy fázisátalakulást is tartalmazó állapotegyenletet hasonlítottak össze. Az elért maximális sűrűsödés a fázisátalakulást tartalmazó esetben nagyobb volt, és a felsűrűsödött tartomány hosszabb ideig maradt fenn, de a hatáskeresztmetszetben csak igen kis eltérést észleltek, ami kisebb volt, mint a hidrodinamikai modellek feltételezett számítási pontossága.

7.2.2 A háromszor differenciális hatáskeresztmetszetben tapasztalható eltérések. — A már említett viszkózus két dimenziós hidrodinamikai modellben, amelyhez a párolgási modell egyszerűbb változatát is hozzácsatoltuk (Bu81ab), megvizsgáltuk az állapotegyenletben fellépő fázisátalakulás hatását (Bu81c). Az állapotegyenletet egyszerű paraméteres formában adtuk meg, amely két egymást $2n_0$ sűrűségnél metsző parabolából állt. Ez az állapotegyenlet ugyan nem folytonosan differenciálható, viszont az instabilitási tartomány egyetlen pontra korlátozódik ($n=2n_0$). Az első, normál maganyagot leíró, parabola minimumát -16 MeV-nél rögzítettük, míg a másikat változtattuk ($-12, -32$ MeV).

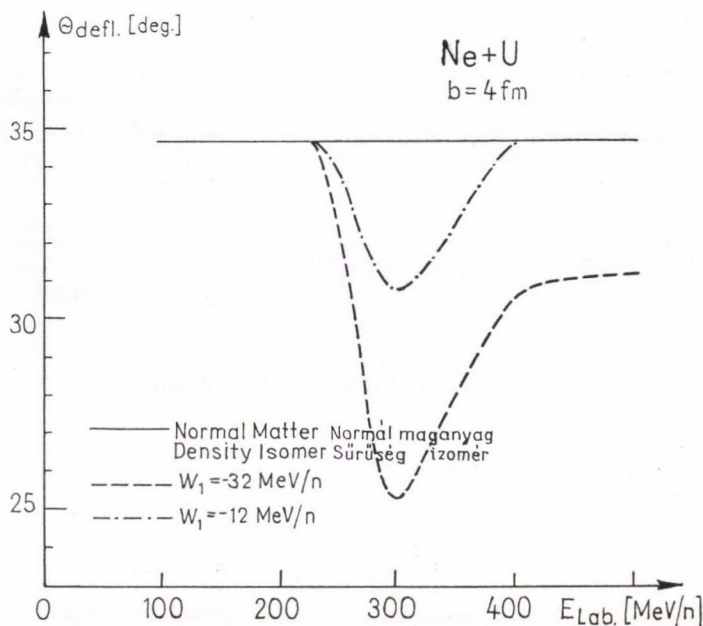
Az inkluzív hatáskeresztmetszetekben mi sem kaptunk lényeges eltérést, mert az azimut szögére való átlagolás és az ütközési paraméterre történő integrálás ezeket eltüntette. A fázisátalakulás azonban több észlelhető küszöbszerű jelenséget is okozott. A fázisátalakuláskor fellépő hőmérsékletnövekedés a háromszor differenciális hatáskeresztmetszetben a céltárgy mag oldalán a termikus emisszió megnövekedését okozza, ami a gerjesztési függvényben észlelhető (27. ábra). Ennek meghatározásához különböző nyaláb energiákon kell méréseket végezni, és a reakciók azonosítása után a nyalábenergia felénél a céltárgy oldalán meghatározni a háromszor differenciális hatáskeresztmetszetet. A gerjesztési függvényben észlelhető ugrás majdnem egy nagyságrendnyi, viszont azt is meg kell jegyeznünk, hogy ezt az állapotegyenletben az igen mély (-32 MeV) második minimum feltételezésével kaptuk, és hogy a kísérleti eljárás összetettsége sok pontatlanságra ad módot, ami nem teszi ezt a módszert túlzottan reménykeltővé.

Számításunk igazolta azt az önként adódó várakozást is, hogy a fázisátalakulásnak a félrecsúszási folyamatban is meg kell nyilvánulnia. A fázisátalakulás hatására csökkenő nyomás csökkenti a félrecsúszás szögét. A rögzített ütközési paraméter mellett különböző nyalábenergiáknál elvégzett számításokban a fázisátalakulás elérésekor a félrecsúszási szög csökkent (28. ábra). A csökkenés $4-10^\circ$ -os értéke azonban a félrecsúszási csúcs 20° -os szélessége miatt éppen az észlelhetőség határán van. Az ütközési paraméter kísérleti meghatározása pedig további bizonytalanságokat és nehézségeket okoz.

Amint a fentiekben láthattuk, az eddigi próbálkozások ellenére még nem sikerült egyértelmű és könnyen megvalósítható módszert kidolgozni a fázisátmenetek kimu-



27. ábra. A fázisátmenet hatása a hatáskeresztmetszetre 2-dimenziós viszkózus hidrodinamikai számítás (Bu81c) alapján. A 3-szor differenciális hatáskeresztmetszetet a target oldalán levő $\varphi=180^\circ$ -os azimutszögnél a nyalábenergia felénél a polárszögre integráltuk, és az így kapott hatáskeresztmetszetet ábrázoltuk a nyalábenergia függvényeként. Az így nyert gerjesztési függvényben a fázisátalakulás észlelhető ugrást okoz (szaggatott vonal), míg fázisátalakulás nélkül a függvény lineáris



28. ábra. A félrecsúszási szög gerjesztési függvénye. A félrecsúszási szöget a háromszor differenciális hatáskeresztmetszet $\varphi = 0^\circ$ (nyaláb oldal) és $E = E_p/2$ energiánál mért polárszög szerinti maximumának helyével definiáljuk. A folytonos vonal a fázisátalakulás nélküli, a szaggatott -32 MeV , a pontozott-szaggatott -12 MeV mélységű második minimummal rendelkező állapotegyenlethez tartozik

tatására. Az eddigi eredmények nyomán a helyzet nem kilátástalan és további elméleti vizsgálatok szükségességére mutat rá. A forró és sűrű mag- (vagy kvark-) anyag tulajdonságainak megismerése azonban feltétlenül megéri a ráfordított munkát.

8. A HIDRODINAMIKAI MODELL TOVÁBBFEJLESZTÉSE

Az eddigiekben bemutatott munkákban az egy folyadék hidrodinamikai modellt és a reakció végső fázisát leíró párolgási modellt használtuk. A reakció kezdeti szakaszáról feltettük, hogy az ütköző magok anyaga azonnal termalizálódik. Láttuk azonban, hogy mai ismereteink szerint ez a feltevés csak egy bizonyos energiatartományban igaz, azon felül a termalizáció folyamata már explicit figyelembe veendő (4. ábra). Az első ilyen jellegű próbálkozás a hidrodinamikai modellen belül a két-folyadék hidrodinamika (Am78). Ebben a modellben a céltárgy és a nyaláb mag anyagát külön-külön hidrodinamikai egyenletrendszer írja le, amelyeket a nukleonok mikroszkopikus ütközéseinek alapuló csatolási tagok kötnék össze. A modellben a két folyadék mélyen egymásba hatolt, és a csatolás csak lassan fékezte le őket egymással azonos sebességre. A csatolás erősségétől függően arra is

lehetőség nyílt a modellben, hogy a két mag egymáson teljesen áthatoljon bizonyos lassulás árán.

A későbbi vizsgálatok a kinetikus elméletben nem támasztották alá a két-folyadék modell feltevéseit (Ra79, Da80). A termalizáció nem a két mag impulzus-eloszlásának egymáshoz való közeledése útján megy végbe, hanem a nukleon-nukleon ütközések egy termikus „hátteret” alakítanak ki, ami egyre növekszik és végül a nukleonok nagy részét tartalmazza. Az éles csúcsok az impulzuseloszlásban a céltárgy és a nyaláb mag impulzusa körül nem közelítik egymást, hanem amplitúdójuk csökken.

Ezeknek az eredményeknek az ismeretében kezdtük meg egy három folyadék hidrodinamikai modell kidolgozását, amely a termalizáció folyamatát jobban közelíti.

8.1 A három folyadék hidrodinamika

Kiindulásul a Boltzmann-transzport elméletet választottuk, amelyből az egy folyadék hidrodinamika is levezethető (Hu63, Gr80, St71, Oc79). Egy korábbi hasonló jellegű próbálkozástól (Ma80, 81) eltérően a nukleonok lokális sebesség-eloszlását három tag összegeként írjuk fel (Cs81f):

$$f(v, r, t) = \sum_i f_i(v, r, t), \quad i = 1, 2, 3. \quad (8.1)$$

Az összeg eloszlásra felírt Boltzmann-transzport egyenletből a hidrodinamika öt egyenlete (3.5), a szokásos módon leszármaztatható. A nyomás tenzor és a hővezetés meghatározásánál a problémát az okozza, hogy az ismert egyensúlyi vagy ahhoz közeli állapotegyenletek nem alkalmazhatók.

A három-folyadék modellben, ahol rögzítjük az összeg komponenseinek tulajdonságait, a probléma lényegesen leegyszerűsödik. Az említett kinetikus elméletbeli eredmények alapján az 1. és 2. komponenst a céltárgy és a nyaláb mag eloszlásával, míg a 3. komponenst a termalizálódott nukleonokéval azonosítjuk. Az 1. és 2. komponensek sebességének várható értékét rögzítjük az u_1, u_2 kezdeti értékekre, és hasonlóképpen T_1 és T_2 hőmérsékletüket is. Így ezen eloszlásokban csak a lokális sűrűség maradt szabad paraméter.

A Boltzmann-egyenlet azonban még így sem szeparálható egyértelműen a komponensekre, és ezért további feltevéseket kell tennünk arról, hogy egy ütközés két adott komponensbe tartozó nukleon között melyik komponenst populálja. E probléma megoldására a hadron kémiai modellben (Mo79) már alkalmazott feltevést használjuk, hogy egy komponensen belüli ütközések magát az adott komponenst populálják, míg különböző komponensek közöttiek a 3. termikus komponenst. Ezen feltételek mellett a Boltzmann-egyenlet már szeparálható, és a komponensekre is levezethetők a hidrodinamikai egyenletek. A problémát azonban az okozza, hogy ebben az esetben a levezetés során nem tűnnek el az ütközési integrálok és komplikált csatolási tagokra vezetnek a komponens folyadékok között. Így az egyenletrendszer gyakorlati megoldása további közelítéseket tesz szükségessé.

Az u_1, u_2, T_1, T_2 állandóságára tett kikötéseink miatt azonban lehetőség nyílik a probléma megoldására egyszerűbb módon is. A komponensek közül elegendő kettőre felírunk a hidrodinamikai egyenleteket, mert a fennmaradó komponens jellemzőit a megmaradási tételekből és az össz folyadéokra érvényes (ütközési integrálokat nem tartalmazó) hidrodinamikai egyenletekből (2.5) megkaphatjuk. Ha az

1. és 2. komponenst választjuk ki, akkor tovább egyszerűsödik a helyzet, mivel kikötéseink miatt itt csak a kontinuitási egyenletre van szükségünk, és ebben csak viszonylag egyszerű ütközési integrálok lépnek fel. Így a modellben a (2.5) egyenletekhez csak két további egyenletet kell csatolnunk:

$$\begin{aligned} DN_1 &= -(\Delta u_1 \cdot \text{grad}) N_1 - Z_{12} - Z_{13}, \\ DN_2 &= -(\Delta u_2 \cdot \text{grad}) N_2 - Z_{22} - Z_{23}, \end{aligned} \quad (8.2)$$

ahol Z_{ik} az i és k komponensek közti ütközések száma egységnyi térfogatban és idő alatt, és $\Delta u_i = u_i - v$ az i -edik komponens eloszlás átlagsebességének eltérése az összfolyadék v áramlási sebességétől. N_1 és N_2 ismeretében az $N = N_1 + N_2 + N_3$ normálási feltételből N_3 meghatározható, és hasonlóképpen $M = N_1 u_1 + N_2 u_2 + N_3 u_3$ -ból u_3 is. T_3 az $e(r, t)$ energiasűrűségéből az $e(n_i, T_i, u_i)$ nemegyensúlyi „állapotegyenlet” felhasználásával határozható meg.

8.2 A forrástagok

A (3.5), (8.2) egyenletrendszer megoldásához szükségünk van az egyenlet forrástagjainak — a nyomástenzornak, a hővezetésnek, az ütközési számoknak — és az anyag állapotegyenletének ismeretére. Az egyensúlytól távoli rendszerben ezeket csak elméleti modellekből kaphatjuk meg jelenleg, de nem kell feltétlenül az ideális gáz közelítést alkalmaznunk, mint a kiindulásnak tekintett Boltzmann-egyenletben, hanem modellünket általánosíthatjuk kölcsönható rendszerekre is. Lovas (Lo80) a Walecka-féle átlagtér elméletben meghatározta egy szimmetrikus két komponensű nemegyensúlyi hideg maganyag nyomástenzorát és energiasűrűségét. A modell kiterjesztése $T=0$ hőmérsékletre (Lo81b) és nonszimmetrikus esetre folyamatban van.

Az itt ismertetett modell teljessége kedvéért az alábbiakban levezetés nélkül megadjuk az ideális nemegyensúlyi Boltzmann gázkeverék forrástagjait (Cs81f), alapján:

$$\begin{aligned} p^{jl} &= \sum_{i=1,3} n_i (T \delta^{jl} + m \Delta u_i^j \Delta u_i^l), \\ e &= \sum_{i=1,3} n_i (3T_i/2 + m \Delta u_i^2/2), \\ q &= \sum_{i=1,3} n_i \Delta u_i (5T_i/2 + m \Delta u_i^2/2), \\ Z_{ik} &\simeq \sigma_{\text{tot}} n_i n_k \sqrt{D^2 + b}, \end{aligned} \quad (8.3)$$

ahol $D = |u_i + u_k|$, $b = (16T/\pi m) (1 + (\Delta T/T)^2/2)^2$, $T = (T_i + T_k)/2$,
és

$$\Delta T = T_i - T_k.$$

A forrástagok meghatározása realisztikus kölcsönhatást tartalmazó modellekben jelenleg folyamatban van, és az első numerikus próbálkozások az egyenletrendszer megoldására biztatóak. A termalizáció gyorsasága az egy-dimenziós modellben a kinetikus elméletben kapott eredményekkel jól egyezik.

Az itt röviden bemutatott modell 3-dimenziós változatához komoly reményeket fűzhetünk, mivel nagymértékben kiterjeszti a hidrodinamikai modell alkalmazhatóságát magasabb energiák felé. A magasabb energiákon fellépő fázisátalakulások tanulmányozására pedig mostanáig egyedül a hidrodinamikai modellekben nyílt lehetőség. Rámutattunk továbbá, hogy magas energiákon, ahol az egyensúlyt nem azonnal érzük el, a nemegyensúlyi maganyag tulajdonságait is ismernünk kell ahhoz, hogy az ütközést megfelelően leírassuk. Az ilyen anyagban a transzportfolyamatok (a hővezetés és a nyomástenzor nemdiagonális elemei által létrehozott transzport) nem másodrendűek az egyensúlyi jellemzők mellett, hanem meghatározhatják az ütközés kezdeti szakaszának lefolyását.

9. ÖSSZEFOGLALÁS

A disszertáció a relativisztikus nehéz-ion reakciók elméletének egy részterületére korlátozódik, a maganyag kollektív tulajdonságainak vizsgálatát és ezen kollektív tulajdonságok kísérleti vizsgálatának lehetőségeit elemzi.

9.1 A relativisztikus nehéz-ion reakciók elméletéről

Mielőtt rátérnénk az eredmények értékelésére és a távolabbi kilátások elemzésére, néhány általános megjegyzést teszünk az elméleti vizsgálatok mai helyzetéről. A kísérletek sokrétűsége és összetettsége nagy kihívást jelent az elméletnek, és így igen sok eltérő irányú vizsgálat indult meg. Az itt tárgyalt energiatartományban az elméleti modellek túlnyomó része a klasszikus fizika eszközeit alkalmazza. Ez a hidrodinamikai leírásra is igaz, ahol a kvantum effektusokat csak az állapotegyenlet hordozza. A modellek talán kivétel nélkül már rég ismertek, vagy már ismert elemekből épülnek fel, s így egy elméleti eredmény újdonságértékét nehéz meghatározni. A nehézséget a jelenséghez legjobban illeszkedő elméleti leírás megtalálása jelenti. A relativisztikus nehéz-ion reakciók azonban az elméletek alkalmazhatóságának határterületére esnek, és így ma már eléggé nyilvánvaló, hogy egyetlen elméleti modell a jelenségek teljes sokrétűségét nem képes visszaadni.

Ebben a bonyolult helyzetben a kísérleti vizsgálatoknak nagyon fontos szerepe van. Az egyetlen lehetőség az elméleti modellek értékelésére a kísérletekkel való állandó összevetés. Ennek során a modellek állandó tökéletesítésére és fejlesztésére van szükség. Ez magyarázza meg azt, hogy a hidrodinamikai modell igen sok eltérő úton fejlődik és más elméleti eredményeket is felhasználunk benne. Ez a sokrétűség a kaszkád modellekre talán még inkább igaz.

9.2 A hidrodinamikai modell helyzete

A hidrodinamikai modellt az tűnteti ki a nagyszámú más modell közül, hogy a várt egzotikus jelenségek (lökéshullámok, fázisátmenet) vizsgálatára a leginkább alkalmas. Viszont alkalmazhatóságát eleinte sokan kétségbe vonták, s így az első hidrodinamikai vizsgálatoknak a modell létjogosultságát kellett bizonyítania. Mivel ez pusztán elméleti úton nem volt lehetséges, a kísérleti eredményekkel való össze-

vetés volt a döntő. Ma abban a helyzetben vagyunk, hogy viszonylag jól ismerjük a hidrodinamikai modell érvényességi körét (nagy tömegű rendszerek, $A_p + A_t > 200$, közel centrális ütközései) és már több olyan kísérlet is van ebben a tartományban, amelyeket eddig csak a hidrodinamikai modellek reprodukálnak. Az értekezésben leírt munkák közül a legjelentősebbek éppen ezen kísérletek elméleti leírásai.

A jövő feladata ezen a téren, hogy a modell pontosságát olyan mértékben növeljük, hogy kvantitatív kijelentéseket tehessünk az állapotegyenletről. Ehhez persze a kísérleti vizsgálatok pontosságának is növekednie kell.

9.3 A disszertációbeli munkákról

A disszertáció 4–8. fejezetei foglalják össze saját munkáinkat. Az ezek közül elsőként leírt párolgási modellnek és ennek a hidrodinamikai modellhez való csatlósának a jelentőségét az adja meg, hogy lehetőséget teremtett a kísérletekkel való összehasonlításra a háromszor differenciális p, n, d, t , ^3He és ^4He hatáskeresztmetszetek kiszámításával.

A hidrodinamikai modell tökéletesítésére és továbbfejlesztésére irányuló munkákat az 5. és 8. fejezet tartalmazza. Ezekben egyrészt a korábbi modellekben előforduló problémákra hívtuk fel a figyelmet, másrészt új megoldási módszereket mutattunk be. A 8. fejezetben bemutatott kezdeményezés a hidrodinamikai modell alkalmazhatóságának kiterjesztését célozza.

A 6. fejezet tartalmazza azokat az eredményeket, amelyek a kísérleti eredményekkel való összehasonlítás révén a hidrodinamikai modell alkalmazhatóságát bizonyítják. Szerencsés összeesésnek tudható be, hogy egy kivétellel az összes ilyen munkában részt vehettem. (A Los Alamos-i csoport szintén reprodukálta a félrecsúszási effektust bizonyító harántirányban csúcsos hatáskeresztmetszetet a frankfurti számítások után.)

Végül a fázisátalakulás kimutatására tett javaslatainkat és az ezzel kapcsolatos elemzéseinket a 7. fejezet tartalmazza. A fázisátmenetek hatásainak szisztematikus vizsgálata még további komoly elméleti munkát igényel.

9.4 Az értekezés főbb tudományos eredményeinek összefoglalása

Kidolgoztunk egy egydimenziós relativisztikus viszkózus hidrodinamikai modellt (Cs79a), amelyben megvizsgáltuk a korábbi egyszerű analitikus lökéshullámmodellek alkalmazhatóságát (Cs79c, 80a). A számítások kapcsán megmutattuk, hogy a nemviszkózus elméleti modellekben hőfejlődés nem lehetséges és, hogy a Los Alamosban kidolgozott nemviszkózus hidrodinamikai modellben a hőfejlődést a numerikus viszkozitás okozza (Cs81c). Megvizsgáltuk továbbá a fázisátalakulások figyelembevételének lehetőségeit és módszereit (Cs79b, Lu79). Elemeztük, hogy a hidrodinamikai folyamat során hány részecske hagyhatja el a rendszert, és ennek segítségével megbecsültük, hogy mely tömeghatár felett tekinthető a hidrodinamikai leírás kielégítő közelítésnek (Ba81a).

Kidolgoztunk egy párolgási modellt (Cs79ab, 80b), amely relativisztikus nehézion reakciók hidrodinamikai leírása esetén általánosan alkalmazható és a korábban alkalmazott módszereknél lényegesen pontosabb nukleon hatáskeresztmetszetet

szolgált. Ezt a módszert továbbfejlesztettük (Cs80c, Bu81a) a szabad és az összes nukleon hatáskeresztmetszetek kiszámítására, valamint lokális kémiai egyensúly feltételezésével a $p, n, d, t, {}^3\text{He}$, valamint alfa hatáskeresztmetszetek számítására is (Cs81d, Su81). A módszer pontossága lehetőséget nyújtott arra, hogy a háromszor differenciális hatáskeresztmetszetet a kísérleteket megelőzően elsőként meghatározzuk (St81a, Cs80c).

A kidolgozott gömbszimmetrikus modellben (Cs80b) ellenőriztük a „blast-wave” modell feltevéseit és megmutattuk, hogy a kísérleti eredményt a viszkozitás megfelelő hőmérsékletfüggése esetén modellünk is kielégítően leírja. A vizsgálat megmutatta, hogy míg a „blast-wave” modell feltevése az állandó „break-up” hőmérsékletet illetően helyes, a tágulási sebesség azonban — a „blast-wave” modell feltevéseivel ellentétben — erősen függ a „break-up” pillanatától.

Megvizsgáltuk, hogy a korábban elméletileg már leírt „bounce-off” effektus (St80d) az azimut függő hatáskeresztmetszetben magasabb proton energiákon éles csúcsként kimutatható (St81a), valamint hogy e csúcs szélessége a viszkozitás erősségétől függ. Megmutattuk továbbá, hogy a hatáskeresztmetszetben a visszalökődött céltárgy és a beeső mag járuléka elkülöníthető. Megmutattuk, hogy a kísérletileg észlelt (St80a) közel centrális ütközésekben fellépő, 60–70 fokos polárszög körüli, maximum a hatáskeresztmetszetben a „bounce-off” effektus hatásaként értelmezhető és, hogy ezáltal ez a kísérlet az állapotegyenlet vizsgálatára alkalmas. A két- és három-dimenziós viszkozus hidrodinamikai számítások alapján olyan kísérleti javaslatokat dolgoztunk ki, (Bu81a, St81a) amelyek az állapotegyenlet tulajdonságait és a transzportfolyamatokat érzékenyen és elkülöníthetően tükrözik (Bu81bc). Rámutattunk (Cs80c), hogy az entrópiaprodukció korábbi becslése (*Siemens és Kapusta* által) korrigálandó: a viszkozus folyamatok és a végső párolgás során keletkező összes könnyű részecskék figyelembevételével. Megvizsgáltuk a hidrodinamikai és kaszkád modellek alkalmazhatóságának feltételeit is (Ma80b, St81d).

Kidolgoztunk egy egyszerű bounce-off modellt (Cs81a), és ebben megmutattuk, hogy a kvázi elasztikus nukleon kiszórás kimutatására tervezett proton korrelációs kísérletnek (Ta80ab, Na80), az előzetes várakozással ellentétes eredményei a hidrodinamikai „bounce-off” effektussal magyarázhatók. Így ezen kísérletek az effektus második kísérleti bizonyítékát szolgálták. A kísérlet eredményeit később egy részletes három dimenziós hidrodinamikai és párolgási modellben sikerült kvantitatívan is kielégítően reprodukálni (Cs81be). Ebben a számításban a lineáris kaszkád és a hidrodinamikai modell egyesítése segítségével megvizsgáltuk, hogy a kvázi elasztikus nukleon-nukleon kiszórás mekkora korrekciót okoz (Cs81e).

Megmutattuk, hogy alacsony viszkozitású anyag nem vizsgálható a korábban kifejlesztett 2- és 3-dimenziós hidrodinamikai modellek módszereivel a numerikus viszkozitás miatt és, hogy ennek figyelmen kívül hagyása a hatáskeresztmetszetben is kimutatható energiahányra vezet (Cs81c).

A könnyű magok emisszióját leíró párolgási modell segítségével megmutattuk, hogy az összetett részecske hatáskeresztmetszetek (${}^3\text{He}$, alfa) alkalmasabbak a „bounce-off” effektus kimutatására (Cs80c, 81d). Rámutattunk, hogy az alfa részecskék Bose-kondenzációja a reakció végső fázisában lehetséges (Su81), és hogy ez a lehetőség a „bounce-off” effektus kísérleti vizsgálatát megkönnyítheti. Megmutattuk továbbá, hogy a modell reprodukálja a kísérletileg észlelt neutron többletet a hatáskeresztmetszetben, valamint, hogy kvalitatívan jól leírja a kísérletileg észlelt gyors, könnyű és lassú, nehéz részecskék közötti korrelációs függvény azimut

függését, amelyet más modellek nem reprodukáltak. Ezzel a kollektív folyamatok harmadik kísérleti bizonyítékára is rámutattunk.

Továbbfejlesztettük a hidrodinamikai modellt a magasabb energiákon való alkalmazhatóság érdekében (Cs81f, Lo81a, Ro81), és e célból az egyensúlyra vezető mikroszkopikus folyamatokat beépítettük a modellbe fenomenologikus formában. Az így elméletileg kidolgozott többfolyadék modellek háromfolyadék változatát részletesen megvizsgáltuk, elemeztük a termalizáció folyamatát, és ennek függését az anyag mikroszkopikus jellemzőitől.

Az itt ismertetett munkánk nem egy már lezárt kutatásról számolnak be, ahol már mindent pontosan ismerünk. A maganyag, illetve hadronanyag viselkedésének megismerése ebben az energiatartományban nagy vonzerőt jelent és ez biztosítja a további hasonlóan gyors fejlődést. Ma a kísérleti és elméleti fizika versenyének lehetünk tanúi, és be kell vallani, hogy a kísérleteké a meghatározó szerep. Az elméletek előre pontosan még nem képesek megjósolni egy kísérlet eredményét, habár mint láttuk, vannak már jóslatok (és éppen a hidrodinamikai modellben) a még csak tervezett kísérletek eredményeire. Az, hogy a kísérletek nagy költségek miatt egyelőre a világon csak három helyen (Dubna-i EAI, CERN, LBL) folynak ilyen irányú kísérletek arra vezetett, hogy nagyszabású nemzetközi együttműködés alakult ki. Azzal a reménnyel zárhatjuk tehát a disszertációt, hogy az együttes erőfeszítések nemsokára nagymértékben fogják gyarapítani ismereteinket az anyag tulajdonságairól.

10. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Mindenekelőtt Zimányi Józsefnek tartozom köszönettel, ő indítványozta 1978-ban, hogy kezdjek el ezzel a témával foglalkozni, és később is közös munkáink kapcsán sokszor volt segítségemre.

Szeretnék köszönetet mondani munkatársaimnak is, *Lovas Istvánnak* és *Lukács Bélának*, a Központi Fizikai Kutató Intézetben, valamint *Fái Györgynek*, az ELTE Elméleti Fizikai Tan-
székén. Ezúton is köszönöm *Doleschall Pálnak* a kézirat gondos átolvasását.

Eredményeim egy részét különböző más kutatócsoportok tagjaként értem el. Munkatársaim voltak a Zentralinstitut für Kernforschung, Dresden, NDK, az Institut für Theoretische Physik, Univ. Frankfurt/M, Frankfurt, NSZK, Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt, NSZK és a Lawrence Berkeley Laboratory, Berkeley CA, USA kutatói. Öszinte örömmel tölt el, hogy mindannyiuknak köszönetet mondhatok: *Hanns-Werner Barz*nak, *Gerd Buchwald*nak, *Gerhard Graebner*nek, *Walter Greiner*nek, *Jörn Knoll*nak, *Hanns Krusén*nek, *Joachim Maruhn*nak, *Shoji Naga-*
miyanak, *Albrecht Rosenhauren*ak, *Horst Stöcker*nek, *Pal Subramaniannak* és *Isao Tanihatán*ak.

Köszönettel tartozom továbbá számos kollégámnak otthon és külföldön, magyarázatokért, ötletekért és értékes segítségért.

Végül, de nem utolsósorban szeretnék köszönetet mondani az Alexander von Humboldt Alapítványnak, a Zentralinstitut für Kernforschungnak, a frankfurti Egyetem Elméleti Fizikai Intézetének, a Gesellschaft für Schwerionenforschungnak, és a Lawrence Berkeley Laboratory-nak, Niels Bohr Intézetnek, és a darmstadti Technische Hochschulenak, hogy munkámat támogatták.

IRODALOM

- Am66 A. A. Amsden, Los Alamos Scientific Lab. Rep. La-3466, 1966.
Am75 A. A. Amsden, G. F. Bertsch, F. H. Harlow, J. R. Nix, Phys. Rev. Lett. 35, 905, 1975.
Am77 A. A. Amsden, F. H. Harlow, J. R. Nix, Phys. Rev. C15, 2059, 1977.
Am78 A. A. Amsden, A. S. Goldhaber, F. H. Harlow, J. R. Nix, Phys. Rev. C17, 2080, 1978.
Ba81a H. W. Barz, L. P. Csernai, W. Greiner, University of Frankfurt Report No. UFTP-62/1981,
Phys. Rev. C26, 740, 1982.
Ba81b H. W. Barz, B. Lukács, J. Zimányi, Gy. Fái, B. Jakobsson, Z. Phys. A 302, 73, 1981.

- Ba75 *H. G. Baumgardt, J. U. Schott, Y. Sakamoto, E. Schopper, H. Stöcker, J. Hoffmann, W. Scheid, W. Griner*, *Z. Phys.* A273, 359, 1975.
- Ba79 *H. G. Baumgardt, E. Schopper*, *J. Phys. Lett.* G5, L231, 1979.
- Ba81c *H. G. Baumgardt, E. M. Friedlander*, *J. Phys. Lett.* G7, L175, 1981.
- Ba81d *G. Baym*, *Nucl. Phys.* A352, 355, 1981.
- Be78 *G. Bertsch, A. A. Amsden*, *Phys. Rev.* C18, 1293, 1978.
- Be81 *G. Bertsch*, *Phys. Rev. Lett.* 46, 472, 1981.
- Be71 *H. A. Bethe*, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* 21, 93, 1971.
- Be79 *H. A. Bethe, G. E. Brown, J. Applegate, J. M. Lattimer*, *Nucl. Phys.* A324, 487, 1979.
- Bi79 *K. van Bibber et al.*, *Phys. Rev. Lett.* 43, 840, 1979.
- Bi81 *T. Bíró, J. Zimányi*, *Cent. Res. Ins. For Phys. Budapest Rep. No. KFKI-1981. 69.*
- Bj79 *J. D. Bjorken, L. D. McLerran*, *Phys. Rev.* D20, 2353, 1979.
- Bl76 *J. P. Blaizot, D. Gogny, B. Grammaticos*, *Nucl. Phys.* A265, 315, 1976.
- Bo77 *J. Boguta, J. Rafelski*, *Phys. Lett.* 71B, 22, 1977.
- Bo79 *J. P. Bondorf*, *Proc. of EPS Topical Conf. on Large Amplitude Collective Nuclear Motions, Keszthely, Lake Balaton, Hungary 10–16 June, 1979; KFKI Budapest (1979) Vol. II, p. 482.*
- Bo78 *J. P. Bondorf, S. Garpman, J. Zimányi*, *Nucl. Phys.* A296 320, 1978.
- Bo81 *J. P. Bondorf, Yu. B. Ivanov, J. Zimányi*, *Physica Scripta*, 24, 514, 1981.
- Bo73 *J. P. Boris, D. L. Book*, *J. Comp. Phys.* 11, 38, 1973.
- Br76 *G. E. Brown, W. Weise*, *Phys. Rep.* C27, 1, 1976.
- Bu81a *G. Buchwald, L. P. Csernai, J. Maruhn, W. Greiner, H. Stöcker*, *Phys. Rev.* C24, 135, 1981.
- Bu81b *G. Buchwald, L. P. Csernai, G. Graebner, A. Rosenhauer, H. Stöcker, J. Maruhn, W. Greiner*, *Proc. XIX Int. Winter Meeting on Nucl. Phys. Bormio Italy, January 26–31, 1981 (Univ. of Milano, 1981) Vol. 2 p. 617.*
- Bu81c *G. Buchwald, L. P. Csernai, G. Graebner, J. Maruhn, W. Greiner, H. Stöcker*, *University of Frankfurt Report No. UFTP-53/1981, Z. Phys.* A303, 111, 1981.
- By73 *E. Byckling, K. Kajantie*, *Particle Kinematics* (Wiley, New York, 1973).
- Ca79 *D. J. E. Callaway, L. Wilets, Y. Yariv*, *Nucl. Phys.* A327, 250, 1979.
- Ch73 *G. F. Chapline, M. H. Johnson, E. Teller, M. S. Weiss*, *Phys. Rev.* D8, 4302, 1973.
- Ch79 *S. A. Chin, A. K. Kermann*, *Phys. Rev. Lett.* 43, 1292, 1979.
- Co80 *M. T. Collins, J. J. Griffin*, *Nucl. Phys.* A248, 63, 1980.
- Cs75 *L. P. Csernai, D. Kisdi, J. Némethy*, *Acta Phys. Hung.* 38, 89, 1975.
- Cs79a *L. P. Csernai, H. W. Barz, B. Lukács, J. Zimányi*, *Proc. of EPS Topical Conf. on Large Amplitude Collective Nuclear Motions, Keszthely, Lake Balaton, Hungary 10–16 June, 1979; (KFKI Budapest, 1979.) Vol. II., p. 533.*
- Cs79b *L. B. Csernai, B. Lukács*, *Central Research Institute for Physics, Budapest Report No. KFKI 58, 1979.*
- Cs79c *L. P. Csernai, Gy. Fáti*, *Central Research Institute for Physics, Budapest Report No. KFKI 66, 1979.*
- Cs79d *L. P. Csernai, B. Lukács, J. Zimányi*, *Proc. Int. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nucl. Excitations, VII., Hirschegg, Austria, Jan. 15–27, 1979, ed. by H. Feldmeier (Technische Hochschule Darmstadt, 1979). Vol. A, p. 133.*
- Cs80a *L. P. Csernai, B. Lukács, J. Zimányi*, *Nuovo Cim. Lett.* 27, 111, 1980.
- Cs80b *L. P. Csernai, H. W. Barz*, *Z. Phys.* A296, 173, 1980.
- Cs80c *L. P. Csernai, P. R. Subramanian, G. Buchwald, G. Graebner, H. Kruse, J. A. Maruhn, H. Stöcker, W. Greiner*, *University of Frankfurt Report No. UFTP-37/1980. Proc. of the 4th Nordic Meeting on Intermediate and High Energy Nuclear Phys., Geilo, Norway Jan. 5–9, 1981 (Univ. of Lund, Lund, 1981) p. 20.*
- Cs80d *L. P. Csernai*, *Proc. Int. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nucl. Excitations, VIII., Hirschegg, Austria, Jan. 14–19, 1980, ed. by H. Feldmeier (Technische Hochschule, Darmstadt, 1980) p. 36.*
- Cs81a *L. P. Csernai, W. Greiner*, *Phys. Lett.* 99B, 85, 1981.
- Cs81b *L. P. Csernai, H. Stöcker, W. Greiner*, *Proc. Int. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nucl. Excitations, IX., Hirschegg, Austria, Jan. 19–24, 1981, ed. by H. Feldmeier (Technische Hochschule, Darmstadt, 1981) p. 172.*
- Cs81c *L. P. Csernai, H. Stöcker*, *Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-12788 (1981), Phys. Rev.* C25, 3208, 1982.

- Cs81d *L. P. Csernai, G. Buchwald, J. A. Maruhn, H. Stöcker, P. R. Subramanian, W. Greiner*, Proc. XIX Int. Winter Meeting on Nucl. Phys. Bormio Italy, January 26—31, 1981 (Univ. of Milano 1981) Vol. 2, p. 581.
- Cs81e *L. P. Csernai, W. Greiner, H. Stöcker, I. Tanihata, S. Nagamiya, J. Knoll*, Lawrence Berkeley Laboratory Rep. No. LBL-12660 (1981), Phys. Rev. C25, 2482, 1982.
- Cs81f *L. P. Csernai, I. Lovas, J. Maruhn, A. Rosenhauer, J. Zimányi, W. Greiner*, University of Frankfurt Report No. UFTP-64/1981, Phys. Rev. C26, 149, 1982.
- Cu81a *J. Cugnon, T. Mizutani, J. Vermeulen*, Nucl. Phys. A352, 505, 1981.
- Cu81b *J. Cugnon, S. E. Koonin*, Nucl. Phys. A353, 477, 1981.
- Cu81c *J. Cugnon, J. Knoll, J. Randrup*, Nucl. Phys. A360, 444, 1981.
- Da79 *P. Danielewicz*, Nucl. Phys. A314, 465, 1979.
- Da80a *P. Danielewicz, J. M. Namislovski*, Warsaw University Report No. IFT 12/80 (1980).
- Da80b *P. Danielewicz*, Proc. Int. Conf. on Extreme States in Nuclear Systems, Contributed Papers, Febr. 4—9, 1980, Dresden, DDR (ZfK, Dresden Rep. No. 404, 1980) p. 10.
- Fr80 *E. M. Friedlander, R. W. Gimpel, H. H. Heckmann, T. J. Karant, B. Judek, E. Ganssauge*, Phys. Rev. Lett. 45, 1048, 1980.
- Ga78 *V. M. Galitskii, I. N. Mishustin*, Phys. Lett. 72B, 285, 1978.
- Ga79a *V. M. Galitskii, I. N. Mishustin*, Yad. Fiz. 29, 363, 1979, Sov. J. Nucl. Phys. 29, 181, 1979.
- Ga79b *V. M. Galitskii, Yu. B. Ivanov, V. A. Khangulyan*, Yad. Fiz. 30, 1979, 778, Sov. J. Nucl. Phys. 30, 401, 1979.
- Ga80a *S. I. A. Garpman*, Proc. Int. Conf. on Extreme States in Nuclear Systems, Dresden Febr. 4—9, 1980 (Zentralinstitut für Kernforschung, Dresden, ZfK-430, 1980) Vol. 11, p. 16.
- Ga80b *S. I. A. Garpman, D. Sperber, M. Zielinska-Pfabre*, Phys. Lett. 90B, 53, 1980.
- Gl81 *N. K. Glendenning*, Phys. Rev. C23, 2757, 1981.
- Go77 *J. Gosset, H. H. Gutbrod, W. G. Meyer, A. M. Poskanzer, A. Sandoval, R. Stock, G. Westfall*, Phys. Rev. C16, 629, 1977.
- Go78 *J. Gosset, J. I. Kapusta, D. Westfall*, Phys. Rev. C18, 844, 1978.
- Gr80 *S. R. de Groot, W. A. van Leeuwen, Ch. G. van Weert*, Relativistic Kinetic Theory (North Holland Amsterdam, 1980).
- Gr81a *G. Graebner et al.*, University of Frankfurt Report to be published.
- Gr81b *W. Greiner*, Summary talk, Proc. of the Adriatic EPS Study Conf. on the Dynamics of Heavy Ion Collisions, Hvar, May 25—30, 1981 (North-Holland Amsterdam 1981) p. 359.
- Gu79 *K. K. Gudima, H. Iwe, V. D. Toneev*, J. Phys. G5, 229, 1979.
- Gu76 *H. H. Gutbrod, A. Sandoval, P. J. Johansen, A. M. Poskanzer, J. Gosset, W. G. Meyer, G. D. Westfall, R. Stock*, Phys. Rev. Lett. 37, 667, 1976.
- Gu80a *H. H. Gutbrod*, Proc. Int. Conf. on Extreme States in Nuclear Systems, Dresden Febr. 4—9, 1980 (Zentralinstitut für Kernforschung, Dresden, ZfK-430, 1980) Vol. 11, p. 76.
- Gu80b *H. H. Gutbrod*, Lawrence Berkeley Laboratory Rep. LBL-11123 (1980) Proc. of Symp. on High Energy Nuclear Int. Hakone, Japan ed.: K. Nakai July, 1980 p. 93.
- Gy77 *M. Gyulassy, W. Greiner*, Ann. Phys. 109, 485, 1977.
- Gy78 *M. Gyulassy, S. K. Kauffmann*, Phys. Rev. Lett. 40, 298, 1978.
- Gy79 *M. Gyulassy*, Proc. of EPS Topical Conf. on Large Amplitude Collective Nuclear Motions, Keszthely, Lake Balaton, Hungary 10—16 June, 1979; (KFKI, Budapest, 1979) Vol. 11, p. 601.
- Gy80 *M. Gyulassy*, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-11790 (1980).
- Gy81 *M. Gyulassy*, Nucl. Phys. A354, 395c, 1981.
- Ha76 *F. H. Harlow, A. A. Amsden, J. R. Nix*, J. Comp. Phys. 20, 119, 1976.
- Ha80 *K. M. Hartmann, B. Schürmann*, Z. Phys. A297, 311, 1980.
- Ho76a *J. Hofmann, W. Scheid, W. Greiner*, Nuovo Cim. 33A, 343, 1976.
- Ho76b *J. Hofmann, H. Stöcker, U. Heinz, W. Scheid, W. Greiner*, Phys. Rev. Lett. 36, 88, 1976.
- Hu63 *K. Huang*: Statistical mechanics (Wiley, New York, London 1963).
- Hü77 *J. Hüfner, J. Knoll*, Nucl. Phys. A290, 460, 1977.
- Ja75 *B. Jakobsson, R. Kulberg, I. Otterlund*, Z. Phys. A272, 159, (1975).
- Ja79 *B. Jakobsson, J. P. Bondorf, G. Fái*, Phys. Lett. 82B, 35, (1979).
- Ka77 *J. I. Kapusta*, Phys. Rev. C16, 1493, (1977).
- Ka80a *J. I. Kapusta*, Phys. Rev. C21, 1301, (1980).
- Ka81a *J. I. Kapusta, D. Strottman*, Phys. Rev. C23, 1282, (1981).
- Ka81b *J. I. Kapusta, D. Strottman*, Los Alamos Scientific Laboratory Report No. LA-UR-81-795, (1981).
- Kn79a *J. Knoll*, Phys. Rev. C20, 773, (1979).

- Kn79b *J. Knoll, J. Randrup*, Nucl. Phys. A324, 445, (1979).
 Kn80 *J. Knoll*, Nucl. Phys. A343, 511, (1980).
 Kn81 *J. Knoll, J. Randrup*, Phys. Lett. 103B, 264, (1981).
 Ku65 *R. Kubo*, Statistical Mechanics (North-Holland, Amsterdam 1965).
 La53 *L. D. Landau, E. M. Lifshitz*, Fluid mechanics (Nauka, Moscow 1953).
 La54 *L. D. Landau, E. M. Lifshitz*, Statistical physics, (Nauka, Moscow 1954.)
 Le74 *T. D. Lee, G. C. Wick*, Phys. Rev. D9, 2291, (1974).
 Le79 *M. C. Lemaire, S. Nagamiya, S. Schnetzer, H. Steiner and I. Tanihata*, Phys. Lett. 85B, 38, (1979).
 Lo80 *I. Lovas*, Nucl. Phys. A367, 509, 1981.
 Lo81a *I. Lovas, J. Zimányi, L. P. Csernai, W. Greiner*, Proc. of the EPS Adriatic Study Conf. on the Dynamics of Heavy Ion Collisions, Hvar, Yugoslavia, May 25—30, 1981 (North-Holland to be published) and Central Research Institute for Physics, Budapest Report No. KFKI-1981-39 (1981).
 Lo81b *I. Lovas, B. Lukács, J. Polonyi*, Kézirat (1981).
 Lu78 *B. Lukács*, Central Research Institute for Physics, Budapest Report No. KFKI-1978-82 (1978).
 Lu79 *B. Lukács, L. P. Csernai*, Proc. of EPS Topical Conf. on Large Amplitude Collective Nuclear Motions, Keszthely, Lake Balaton, Hungary 10—16 June, 1979; (KFKI Budapest, 1979) Vol. 11, p. 662.
 Ma80 *R. Malfliet*, Phys. Rev. Lett. 44, 864, (1980).
 Ma81 *R. Malfliet*, Nucl. Phys. A363, 429, 456, (1981).
 Ma76 *J. A. Maruhn*, Proc. Top. Conf. on Heavy Ion Collisions, Fall Creek Falls State Park, Pikeville Tennessee, USA, (1976) p. 156.
 Ma80b *J. A. Maruhn, G. Buchwald, L. P. Csernai, G. Graebner, H. Kruse, H. Stöcker, P. R. Subramanian, W. Greiner*, Proc. Int. Workshop on Future Relativistic Heavy — Ion Experiments, GSI Darmstadt, Oct. 7—10, 1980, Eds. *R. Bock, R. Stock* (GSI Darmstadt, Rep. No. 81—6 1981) p. 372.
 Mc81 *L. D. McLerran*, Proc. Int. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nucl. Excitations, Hirschegg, Austria, Jan. 19—24, 1981, ed. by *H. Feldmeier* (Technische Hochschule Darmstadt, 1981) p. 9.
 Me77 *A. Z. Mekjian*, Phys. Rev. Lett. 38, 604, (1977).
 Me78a *A. Z. Mekjian*, Phys. Rev. C17, 1051, (1978).
 Me78b *A. Z. Mekjian*, Nucl. Phys. A321, 491, (1978).
 Me80 *W. G. Meyer, H. H. Gutbrod, Ch. Lukner, A. Sandoval*, Phys. Rev. C22, 179, (1980).
 Mi73 *A. B. Migdal*, Phys. Rev. Lett. 31, 257, (1973).
 Mi79 *A. B. Migdal, A. I. Chermoutsen, I. N. Mishustin*, Phys. Lett. 83B, 158, (1979).
 Mi80 *I. Mishustin, F. Myhrer, P. Siemens*, Phys. Lett. 95B, 361, (1980).
 Mo79 *I. Montvay, J. Zimányi*, Nucl. Phys. A316, 490, (1979).
 Mü81 *H. Müther*, Proc. XIX Int. Winter Meeting on Nucl. Phys. Bormio Italy, January 26—31, 1981 (Univ. of Milano 1981) Vol. 2 p. 638.
 My76 *W. D. Myers*, Atomic Data Nucl. Data Tabl. 17 411, (1976).
 My78 *W. D. Myers*, Nucl. Phys. A296, 177, (1978).
 Na80 *S. Nagamiya, L. A. Anderson, W. Bruckner, O. Chamberlain, M. C. Lemaire, S. Schnetzer, G. Shapiro, H. Steiner, I. Tanihata*, Phys. Lett. 81B, 174, (1979).
 Na81a *S. Nagamiya, M. C. Lemaire, E. Moller, S. Schnetzer, G. Shapiro, H. Steiner, I. Tanihata*, Phys. Rev. C24, 971, (1981).
 Na81b *J. M. Namisłowski, P. Danielewicz*, Phys. Rev. C23, 1196, (1981).
 Ni79a *J. R. Nix*, Prog. Part. Nucl. Phys. 2, 237, (1979).
 Ni79b *J. R. Nix, A. P. Sierk*, Los Alamos Sci. Lab. Rep. No. LA-UR-79-1623 (1979).
 Ni81 *J. R. Nix, D. Strottman*, Phys. Rev. C23, 2548, (1981).
 Oc79 *Yu. P. Ochelkov, O. F. Prilnickij, I. L. Rosental, V. V. Usov*, Relativistskaja kinetika i hidrodinamika. Atomizdat, 1979.
 Op39 *J. R. Oppenheimer, G. M. Volkoff*, Phys. Rev. 55, 374, (1939).
 Ot79 *I. Otterlund*, Proc. of 8th Int. Conf. on High Energy Phys. and Nucl. Structure, Vancouver, 1979, eds.: *D. F. Measday, A. W. Thomas*. North-Holland, Amsterdam, 1980.
 Ra81 *J. Rafelski*, University of Frankfurt Report No. UFTP-55/1981.
 Ra79 *J. Randrup*, Nucl. Phys. A314, 429, (1979).

- Ro81 A. Rosenhauer, L. P. Csernai, J. Maruhn, W. Greiner, University of Frankfurt Rep. No. UFTP-65/1981 Nuovo Cimento 71a, 215, 1982.
- Ru76 V. Ruck, M. Gyulassy, W. Greiner, Z. Phys. A277, 391, (1976).
- Sa80a A. Sandoval, H. H. Gutbrod, W. G. Meyer, R. Stock, Ch. Lukner, A. M. Poskanzer, J. Gosset, J.-C. Jourdain, C. H. G. King, King, Nguyen, Van Sen, G. D. Westfall, K. L. Wolf, Phys. C21, Rev. 1321, (1980).
- Sa80b A. Sandoval, R. Stock, H. E. Stelzer, R. E. Renfordt, J. W. Harris, J. P. Brannngian, J. V. Geaga, L. J. Rosenberg, L. S. Schroeder, K. L. Wolf, Phys. Rev. Lett. 45, 874, (1980).
- Sa72 R. F. Sawyer, Phys. Rev. Lett. 29, 382, (1972).
- Sc81 D. K. Scott, Nucl. Phys. A354, 375c, (1981).
- Sc68 W. Scheid, R. Ligensa, W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 21, 1479, (1968).
- Sc69 W. Scheid, W. Greiner, Z. Phys. 226, 365, (1969).
- Sc74 W. Scheid, H. Müller, W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 32, 741, (1974).
- Sc79a W. Schimmerling, J. W. Kast, D. Orthendahl, R. Madey, R. A. Cecil, B. D. Anderson, A. R. Baldwin, Phys. Rev. Lett. 43, 1985, (1979).
- Sc78 E. Schopper, H. G. Baumgardt, S. Afr. J. Phys. 1, 129, (1978).
- Sc79c B. Schürmann, Phys. Rev. C20, 1607, (1979).
- Sc81a B. Schürmann, J. Randrup, Phys. Rev. C23, 2766, (1981).
- Sc81b B. Schürmann, K. M. Hartmann, H. J. Pirner, Nucl. Phys. A360, 435, (1981).
- Si79a P. J. Siemens, J. O. Rasmussen, Phys. Rev. Lett. 42, 880, (1979).
- Si79b P. J. Siemens, J. I. Kapusta, Phys. Rev. Lett. 73, 1486, (1979).
- So75 M. I. Sobel, P. J. Siemens, J. P. Bondorf, H. A. Bethe, Nucl. Phys. A251, 502, (1975).
- St79a J. D. Stevenson, Phys. Rev. Lett. 43, 1985, (1979).
- St71 J. M. Stewart, Non-Equilibrium Relativistic Kinetic Theory (Springer, 1971) Lect. Notes in Phys. Vol. 10.
- St80a R. Stock, H. H. Gutbrod, W. G. Meyer, A. M. Poskanzer, A. Sandoval, J. Gosset, C. H. King, G. King, Ch. Lukner, Nguyen Van Sen, G. D. Westfall, K. L. Wolf, Phys. Rev. Lett. 44, 1243, (1980).
- St78 H. Stöcker, W. Greiner, W. Scheid, Z. Phys. A286, 121, (1978).
- St79b H. Stöcker, J. Maruhn, W. Greiner, Z. Phys. A290, 297, (1979).
- St79c H. Stöcker, J. Maruhn, W. Greiner, Z. Phys. A293, 173, (1979).
- St80b H. Stöcker, R. Y. Cusson, J. Maruhn, W. Greiner, Z. Phys. A294, 125, (1980).
- St80c H. Stöcker, J. Hofmann, J. A. Maruhn, W. Greiner, Prog. Part. Nucl. Phys. 4, 133, (1980).
- St80d H. Stöcker, J. Maruhn, W. Greiner, Phys. Rev. Lett. 44, 725, (1980).
- St81a H. Stöcker, L. P. Csernai, G. Graebner, G. Buchwald, H. Kruse, R. Y. Cusson, J. A. Maruhn, W. Greiner, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-11774 (1981) Phys. Rev. C25, 1873, 1982.
- St81b H. Stöcker, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-12302 (1981) Submitted to Phys. Rev. Letters.
- St81c H. Stöcker, B. Müller, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-12471 (1981).
- St81d H. Stöcker, C. Riedel, G. Buchwald, L. P. Csernai, G. Graebner, W. Greiner, J. A. Maruhn, P. R. Subramanian, Y. Yariv, K. Frankel, M. Gyulassy, J. Stevenson, G. Westfall, D. Strottman, J. R. Nix, B. Schürmann, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-12634 (1981) Phys. Rev. Lett. 47, 1807, 1981.
- Su81 P. R. Subramanian, L. P. Csernai, H. Stöcker, J. A. Maruhn, W. Greiner, H. Kruse, University of Frankfurt Report No. UFTP-51/1981; J. Phys. Lett. G 7, L 241, 1981.
- Ta80a I. Tanihata, Lawrence Berkeley Laboratory Report No. LBL-11320 (1980).
- Ta80b I. Tanihata, M.-C. Lemaire, S. Nagamiya, S. Schnetzer, Phys. Lett. 97B, 363, (1980).
- Ta81 I. Tanihata, S. Nagamiya, S. Schnetzer, H. Steiner, Phys. Lett. 100B, 121, (1981).
- Ta80c H. H. Tang, C. Y. Wong, Phys. Rev. C21, 1846, (1980).
- Th81 J. Theis et al., University of Frankfurt Report to be published.
- Th62 W. B. Thompson, An Introduction to Plasma Physics, Pergamon 1962.
- To78 H. Toki, Y. Futami, W. Weise, Phys. Lett. 78B, 547, (1978).
- Ue33 E. A. Uehling, G. E. Uhlenbeck, Phys. Rev. 43, 552, (1933).
- Ue34 E. A. Uehling, G. E. Uhlenbeck, Phys. Rev. 46, 917, (1934).
- We76 G. D. Westfall, J. Gosset, P. J. Johansen, A. M. Poskanzer, W. G. Meyer, H. H. Gutbrod, A. Sandoval, R. Stock, Phys. Rev. Lett. 37, 1202, (1976).
- Wi74 R. Wiczorek, R. W. Hasse, G. Süssmann, Phys. and Chemistry of Fission (TAEA, Vienna, 1974) Vol. I, p. 523.

- Wo79 K. Wolf, H. H. Gutbrod, W. G. Meyer, A. M. Poskanzer, A. Sandoval, R. Stock, J. Gosset, C. H. King, G. King, Nguyen Van Sen, G. D. Westfall, Phys. Rev. Lett. 42, 1448, (1979).
- Wo79 K. Wolf, Proc. of the Workshop on Future Relativistic Heavy Ion Experiments, GSI, Darmstadt, Oct 7—10, 1980 (GSI, rep. 81-6, 1981) p. 23.
- Wo80 G. Wolf, Deutsches Elektronen—Synchrotron DESY Report No. DESY 80/85 September 1980 (1980).
- Wo74 C. Y. Wong, T. M. Welton, Phys. Lett. 49B, 243, (1974).
- Wo75 C. Y. Wong, J. A. Maruhn, T. M. Welton, Nucl. Phys. A253, 469, (1975)
- Wo77 C. Y. Wong, J. A. Maruhn, T. M. Welton, Phys. Lett. 66B, 19, (1977).
- Ya79 Y. Yariv, Z. Frenkel, Phys. Rev. C20, 2227, (1979).
- Zi79 J. Zimányi, G. Fái, B. Jakobsson, Phys. Rev. Lett. 43, 1705, (1979).
- Zi80 J. Zimányi, Proc. of the Workshop on Future Relativistic Heavy Ion Experiments, GSI, Darmstadt, Oct. 7—10, 1980 (GSI, rep. 81-6, 1981) p. 325.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat a nyomdába érkezett: 1983. július 8. — Terjedelem: 9,10 (A/5) ív
83-3067 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

Ára: 15 Ft
Előfizetés kötetenként: 90 Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Forgács Gábor:</i> Kritikus jelenségek sztatikájának és dinamikájának vizsgálata a renormalizációs csoport segítségével	189
<i>Csernai László:</i> Relativisztikus nehéz-ion ütközések hidrodinamikai leírása	231

307 226

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

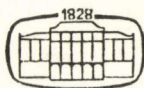
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KRISTÁLYHIBÁK ELMÉLETE*

Szerkesztő:

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék, Budapest

A kristályos szilárdtestek fizikai tulajdonságait alapvetően befolyásolják a bennük levő különböző típusú kristályhibák. A cikksorozat a kristályhibák tulajdonságainak elméleti leírását tárgyalja a jelenlegi irodalmi ismeretek felhasználásával. A dolgozatok alapját az ELTE Általános Fizika Tanszék 1981 januárjában tartott négy napos szemináriumának anyaga képezi.

* Érkezett 1982. nov. 19.

1 Fizikai Folyóirat 84/4

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

I. rész

1. Ponthibák rácsmodellje	293
2. Ponthibák és empirikus potenciálok	319
3. Vakanciák és vakanciakomplexek kétalkotós ötvözetekben	333
4. Vakanciák kondenzációja	355
5. Kiválások és ötvöző atomcsoportok deformációi	371

I. RÉSZ

1. PONTTHIBÁK RÁCSMODELLJE

BÉRCES GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	293
2. Ponthibák kontinuumelmélete	294
3. Adiabatikus potenciál és invariánsai	299
4. Harmonikus közelítés	301
5. Az erőállandó mátrix, és néhány tulajdonsága	302
6. Ideális (hibátlan) kristály	304
7. A hibaképződés energiája	305
8. Ponthiba körüli relaxáció okozta térfogatváltozás	307
9. Ponthibák közötti kölcsönhatás	310
10. Rácselmélet és kontinuumelmélet kapcsolata	312
11. Közvetlen szomszéd kölcsönhatás a rácselméletben	314
12. Összefoglalás	317
13. Irodalom	318

1. Bevezetés

A kristályos anyagok fizikai tulajdonságait jelentős mértékben befolyásolják a ponthibák. A ponthibák tulajdonságainak leírásához olyan feladatokat kell megoldanunk, mint például a ponthibák körüli elmozdulástér, a ponthibák képződési térfogata, képződési energiája, a ponthibák közötti kölcsönhatások stb. meghatározása.

A ponthibák kontinuumelméletét fémfizikai problémák megoldására a negyvenes—ötvenes években alkalmazták először és néhány lényeges kérdésben a kísérleti tapasztalatokkal megegyező eredményre jutottak. Ezekben az elméleti eredményekben azonban több olyan paraméter (a kristály felületi feszültsége, a hiba és a mátrix rugalmas állandóinak különbsége stb.) szerepelt, amelyek nagysága pusztán kontinuumelméleti módszerekkel nem adható meg, pedig számos kísérleti jelenség értelmezésénél ezekre lenne szükség. A besugárzási jelenségek során bekövetkező térfogatnövekedés (irradiation swelling), és a sugárzási kúszás (irradiation creep) azt mutatja, hogy lényeges különbség van a vakanciák, illetve intersticiálisok relaxációs térfogata, továbbá a hibák és a mátrix nyírási modulusza között. Hasonlóan azokról a lokális tulajdonságokról (pl. a rugalmas állandók esetében), amelyek a rácsstorzulások következtében jönnek létre, a kontinuumelmélet nem tud számot adni. A diffúz röntgen és neutron szóródás vagy az elektronok, fononok szóródása a ponthibákon, mind a hiba közvetlen környezetében fellépő rácsstorzulásokkal van kapcsolatban. Az említett problémák természete olyan, hogy a rácselméleti módszerek alkalmazása pontosabb értelmezési lehetőséget kínál.

A dolgozatban először áttekintünk néhány, a ponthibákkal kapcsolatos kontinuumelméleti eredményt, majd ismertetjük a rácselmélet két alapvető technikáját, a Green-függvény módszert, valamint a Fourier-transzformáción nyugvó reciprokok tér közelítést. Ezeket a módszereket alkalmazzuk néhány, a ponthibákkal kapcsolatos tulajdonság vizsgálatában.

2. Ponthibák kontinuumelmélete

A kristályhibák diszkrét rácselmélete sok vonatkozásban mutat hasonlóságot a különböző (klasszikus-, nemlineáris-, nemlokális-) kontinuumelméletekkel. Ezért először áttekintünk néhány, a klasszikus kontinuumelméletből ismert, ponthibák tulajdonságával kapcsolatos eredményt.

A ponthiba egy lehetséges, egyszerű kontinuummechanikai modellje az, amikor a mátrix r_0 sugarú, gömb alakú üregébe egy $r_h > r_0$ sugarú gömböt kényszerítünk, amelynek rugalmas állandói a mátrix rugalmas állandóitól eltérőek is lehetnek. A mátrixba ily módon „beszorított” gömb az intersticiális, illetve szennyező atom modelljének is felfogható. Megmutatható [1, 2], hogy a végtelen nagy, homogén, izotrop mátrixban az

$$u_i(r) = \frac{\varepsilon r_0^3}{r^2} \left(\frac{x_i}{r} \right), \quad r_0 \leq r < \infty \quad (1)$$

a hibában pedig az

$$u_i^h(r) = \left[\frac{r_0}{r_h} (1 + \varepsilon) - 1 \right] r \left(\frac{x_i}{r} \right), \quad 0 < r \leq r_h \quad (2)$$

gömbszimmetrikus elmozdulástér jön létre. A fenti összefüggésekben ε az r_0 sugarú üreg felületének relatív elmozdulását jelöli, amely a hiba és a mátrix érintkezése mentén fellépő feszültségek egyensúlyából határozható meg. Ha (μ, λ) , (μ_h, λ_h) jelöli a mátrix, illetve a hiba Lamé-állandóit, akkor ε -ra az

$$\varepsilon = \frac{\mu_h + \frac{3}{2} \lambda_h}{2\mu + \left(\mu_h + \frac{3}{2} \lambda_h \right)} \left(\frac{r_h - r_0}{r_0} \right) \quad (3)$$

összefüggés adódik [2]. ε ismeretében így a hibában és a mátrixban együttesen felhalmozott rugalmas energiára is tudunk következtetni, amelynek számértéke a hiba-képződés energiájával azonosítható. Ez az E_F energia az

$$E_F = \frac{2\mu K_h}{4\mu + 3K_h} \frac{(\Delta V_0)^2}{V_0} \quad (4)$$

alakban adható meg, ahol K_h a hiba anyagának térfogati rugalmassági állandóját jelöli, $V_0 = 4r_0^3\pi/3$, ΔV_0 pedig az üreg és a hiba térfogatkülönbsége [2, 3]. Előbbi eredményünk lehetőséget nyújt arra, hogy megbecsüljük az intersticiális atomok képződéséhez, szennyező atomok beviteléhez szükséges energia értékét. Alumínium

esetében $a \cong 4 \times 10^{-8}$ cm ($V_0 = a^3/4 \cong 16 \times 10^{-24}$ cm³), $K = 7,2 \times 10^{10}$ N/m², $\mu = 2,7 \times 10^{10}$ N/m² értékekkel számolva és feltételezve, hogy $K_h = K$, az E_F rugalmas energiára

$$E_F \cong 1,2 \left(\frac{\Delta V_0}{V_0} \right)^2 \text{ eV} \quad (5)$$

adódik. Intersticiálisokra, a kísérleti eredmények $\Delta V_0 \cong 0,5 V_0$ körüli értéket szolgáltatnak. Ebben az esetben $E_F \cong 0,3$ eV, míg például Mg szennyező esetén $\Delta V_0/V_0 \cong 0,4$, amellyel $E_F^{\text{Mg}} \cong 0,2$ eV.

Vakanciák esetében az intersticiálisokhoz hasonlóan, nem lehet csak a kontinuumelméletből megadni a hiba erősségét jellemző $\varepsilon r_0^3 = \frac{\Delta V_0}{4\pi}$ értékét. A vakancia képződési energiájára azonban egy egyszerű becslést adhatunk, a mátrix felületi feszültségének ismeretében.

A vakancia képződésekor a kristály belsejéből egy atom kikerül a szabad felszínre (hátrahagyva egy r_0 sugarú üreget), emiatt a kristály térfogata megnő, felszínének növekedését pedig jó közelítéssel a $\Delta F = 4r_0^2\pi$ összefüggés adja meg. A vakancia körüli atomok relaxációja miatt, amelyet most a mátrix α felületi feszültségével veszünk figyelembe, az r_0 sugarú gömb εr_0 -val összehúzódik. Emiatt csökken a kristály felületi energiája, de közben a mátrixban rugalmas energia halmozódik fel, amely az

$$E = 8\pi\mu\varepsilon^2 r_0^3 \quad (6)$$

összefüggés alapján számolható [4, 5]. A vakancia képződéséhez szükséges

$$E_F^V = 4(r_0 + \varepsilon r_0)^2 \pi \alpha + 8\pi\mu\varepsilon^2 r_0^3 \quad (7)$$

energiának egyensúly esetén minimuma van, így

$$\frac{dE_F^V}{d\varepsilon} = 8r_0^2\pi\alpha(1+\varepsilon) + 16r_0^3\pi\mu\varepsilon = 0, \quad (8)$$

amiből

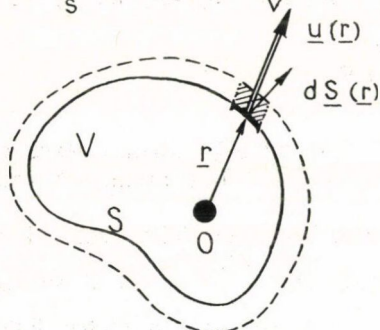
$$\varepsilon \cong -\frac{\alpha}{2\mu r_0}. \quad (9)$$

Ezzel, a relaxációt jellemző ε értékkel (7) az

$$E_F^V \cong 4\pi r_0^2 \alpha - 4\pi \frac{r_0 \alpha^2}{\mu} + 2\pi \frac{r_0 \alpha^2}{\mu} \quad (10)$$

alakban is felírható, ahol a jobb oldal első tagja az r_0 sugarú üreg felszínének kialakításához szükséges energia. A második tag a relaxáció miatt fellépő felületi energiacsökkenés, míg az utolsó tag az üreg relaxációja következtében a mátrixban megjelenő rugalmas energiát adja meg. A $\mu = 2,7 \times 10^{10}$ N/m², $\alpha = 0,83$ N/m, $r_0 \cong 10^{-8}$ cm-rel számolva $\varepsilon \cong 15\%$. $E_F^V = (0,65 - 0,2 + 0,1)$ eV = 0,55 eV, ami jól mutatja, hogy a relaxáció okozta energijárulékok csak kis részét képezik a hiba képződési energiájának.

$$\Delta V_S^\infty = \int_S u_i(\underline{r}) dS_i(\underline{r}) = \int_V \operatorname{div} \underline{u}(\underline{r}) dV(\underline{r})$$



1. ábra. Dilatációs centrum által okozott térfogatváltozáshoz

Tekintsük most azt az esetet, amikor a hiba anyaga igen merev, azaz $\mu/K_h \cong 0$. Ekkor $\varepsilon \cong (r_h - r_0)/r_0$, $\Delta V_0 = 4r_0^3 \pi \varepsilon$, így az (1)-ben szereplő $u_i(\underline{r})$ az

$$u_i(\underline{r}) = -\frac{\Delta V_0}{4\pi} \partial_i \left(\frac{1}{r} \right) \quad (11)$$

alakban is felírható, ahol ∂_i az x_i változó szerinti differenciálást jelöli. Az ilyen elmozdulással jellemezhető kicsiny méretű hibát dilatációs centrumnak nevezzük. A végtelen mátrixban egy tetszőleges, zárt S felület által közrefogott térfogat ΔV_S^∞ meg-

változása a dilatációs centrum jelenlétében (1. ábra):

$$\Delta V_S^\infty = \int_S u_i(\underline{r}) dS_i(\underline{r}) = \begin{cases} \Delta V_0 & \text{ha a hiba a } V \text{ tartomány} \\ & \text{belsejében van} \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases} \quad (12)$$

Eshelby mutatott rá elsőként [6], hogy véges méretű mátrixban a fellépő \underline{u}^I képlemozdulások miatt az eredő ΔV térfogatváltozás különbözik a $\Delta V^\infty = \Delta V_S^\infty = \Delta V_0$ -tól, és a test határfelületétől függetlenül a

$$\Delta V = \Delta V^\infty + \Delta V^I = 3 \frac{1-\nu}{1+\nu} \Delta V^\infty = \gamma \Delta V^\infty \quad (13)$$

alakban adható meg, ahol ν a Poisson-szám.

A (11) alatti dilatációs centrumhoz tartozó gömbszimmetrikus elmozdulástér egy

$$F_i(\underline{r}) = -\Delta V^\infty (\lambda + 2\mu) \partial_i \delta(\underline{r}) = -K \Delta V \partial_i \delta(\underline{r}) \quad (14)$$

origó tartójú „ponterő” képes létrehozni [2]. Ennek az F_i erőnek az

$$F_i(\underline{r}) = -P_{ij} \partial_j \delta(\underline{r} - \underline{r}_0) \quad (15)$$

általánosításával értelmezhető a rugalmas monopólus fogalma [7] (továbbá lásd jelen cikksorozat 6. fejezetét), amelynek az elmozdulástérét az

$$u_i(\underline{r}) = -P_{kj} \partial_k G_{ij}(\underline{r} - \underline{r}_0) \quad (16)$$

kifejezéssel adhatjuk meg ($G_{ij}(\underline{r} - \underline{r}_0)$ a kontinuum Green-függvénye). Megmutatható, hogy ebben az általános esetben a végtelen, homogén, izotrop mátrixban a P_{kj} pólust a középpontjában tartalmazó, S_R felülettel határolt gömb térfogatváltozásának értéke

$$\Delta V_{S_R}^\infty = \frac{P_{ii}}{3} \frac{1-2\nu}{2\mu(1-\nu)} = \frac{P_{ii}}{3(\lambda+2\mu)} \quad (17)$$

független a gömbfelület sugarától. Tetszőleges felülettel határolt anyagrész térfogatának megváltozása azonban már függ a felület választásától. Érdekes azonban, hogy ha egy véges méretű test esetén a szabad felület hatásából származó ΔV^I térfogatváltozást is figyelembe vesszük [7], akkor a pólus által okozott eredő térfogatváltozás csak a póluserősségtől függ és a következő alakban adható meg:

$$\Delta V = \Delta V^\infty + \Delta V^I = \frac{P_{ii}}{3K}. \quad (18)$$

A monopólustól adott r távolságban a

$$\sigma_{rr}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r^2} (x_i \sigma_{ij} x_j) \quad (19)$$

radiális irányú feszültség nagysága általában (a $P_{kj} = P\delta_{kj}$ esetet kivéve) irányfüggést mutat. σ_{rr} átlagértékét kiszámítva az R sugarú gömbfelületre, a

$$\langle \sigma_{rr} \rangle_{r=R} = -\frac{\mu}{\pi} \left(\frac{\Delta V_{SR}^\infty}{R^3} \right) \quad (20)$$

eredmény adódik [8].

A mátrixban levő σ_{ij} feszültségtérnek a ΔV^∞ erősségű dilatációs centrumra gyakorolt hatása egy

$$E = -\frac{1}{3} \sigma_{ii} \gamma \Delta V^\infty \quad (21)$$

kölcsönhatási energiát eredményez, ahol $\sigma_{ii}/3$ a hidrosztatikai feszültségtér a hiba helyén [2, 3, 9]. A ΔV_A^∞ és ΔV_B^∞ erősségű, szigorúan pontszerűnek tekinthető gömbszimmetrikus hibák közötti kölcsönhatási energiára így

$$E_{AB} = -K\gamma \Delta V_A^\infty \Delta V_B^\infty \delta(\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B) \quad (22)$$

adódik. (22) szerint a végtelen mátrixban dilatációs centrumok között nem lép fel kölcsönhatás. Kiterjedt, merev gömböknek tekinthető hibák kölcsönhatását Eshelby vizsgálta részletesen [10]. Számításai szerint a végtelen izotrop mátrixban a tökéletesen merev, gömbszerűnek tekinthető hibák között a kölcsönhatási energia a távolságuk hatodik hatványával fordítottan arányos, és előjele pozitív, ami azt jelenti, hogy ezek a hibák taszítják egymást.

Ha a mátrix μ nyírási modulusza, K térfogati rugalmassági modulusza különbözik a hibák μ_h^A, μ_h^B és K_h^A, K_h^B értékeitől, akkor a méretkülönbségekből adódó kölcsönhatáson túl a rugalmas állandók különbözősége egy többletkölcsönhatást eredményez (moduluszhatás), amelynek nagysága [11, 12]:

$$E_{AB}^m = -\frac{6V_0 [M_A (\Delta V_B^\infty)^2 + M_B (\Delta V_A^\infty)^2]}{(4\pi)^2 r^6}, \quad (23)$$

ahol V_0 jelöli az üregek térfogatát, amelyekbe elhelyeztük a $\Delta V_A^\infty, \Delta V_B^\infty$ erősségű gömb alakú hibákat, r a két hiba közötti távolság, míg az M_A és M_B állandók az

$$M_A = \frac{\mu(\mu - \mu_h^A)}{\mu - \beta(\mu - \mu_h^A)}, \quad \text{illetve} \quad M_B = \frac{\mu(\mu - \mu_h^B)}{\mu - \beta(\mu - \mu_h^B)} \quad (24)$$

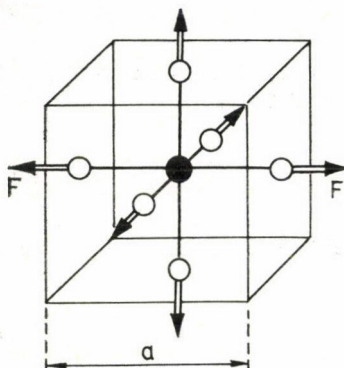
alakban adhatók meg, ahol

$$\beta = \frac{2(4-5\nu)}{15(1-\nu)} \quad (25)$$

(M_h értéke a $\nu=0,2$ esetben könnyen megjegyezhető, ekkor $\beta=0,5$ és $M_h = \frac{\mu}{2} \left(\frac{\mu - \mu_h}{\mu + \mu_h} \right)$). Azonos anyagú és erősségű hibák kölcsönhatása esetén (23)-ból az

$$E_{AB}^m = -\frac{12V_0}{r^6} \left(\frac{\Delta V^\infty}{4\pi} \right)^2 M_h \quad (26)$$

energiaérték adódik.



2. ábra. Rácspontban található hiba körüli centráliszimmetrikus erőrendszer, egyszerű, köbös rácsban

Kézenfekvőnek tűnik az a feltételezés, hogy egy köbös rácsban a hiba körül a szomszédos mátrixatomokra centráliszimmetrikus erőrendszer hat (2. ábra). A hiba véges méretét az F ponterők „ a ” távolságra történő delokalizáltságával figyelembe véve [7, 12] megmutatható, hogy az $u_i(r)$ elmozdulástér már nem lesz gömbszimmetrikus és az origóban levő hiba helyétől különböző pontokban is fellépnek lokális térfogatváltozások, amelyek nagysága:

$$\text{div } \mathbf{u} = \Delta V^\infty \delta - \frac{35}{8} \left(\frac{\Delta V^\infty}{4\pi} \right) a^2 \frac{\Gamma}{r^5} \quad (27)$$

$n=x_3/r$ iránykoszinuszok függvénye:

elsőrendben a hibától mért távolság ötödik hatványával fordított arányban csökken. A (27)-ben szereplő Γ a hiba helyéhez tartozó $l=x_1/r$, $m=x_2/r$,

$$\Gamma(l, m, n) = \left(l^4 + m^4 + n^4 - \frac{3}{5} \right), \quad (28)$$

míg

$$\Delta V^\infty = \frac{1-2\nu}{2\mu(1-\nu)} Fa. \quad (29)$$

Két ponthiba közötti kölcsönhatási energiára (21) és (27) alapján az

$$E_{AB}^V = K\gamma \Delta V_A^\infty \Delta V_B^\infty \delta + \frac{35}{32\pi} K\gamma \Delta V_A^\infty \Delta V_B^\infty a^2 \frac{\Gamma}{r^5} \quad (30)$$

összefüggést nyerjük. E_{AB}^V a két hiba relatív helyzetétől és a köztük levő távolság ötödik hatványától függ. $\langle 100 \rangle$ irányban levő hibák esetén $\Gamma(1, 0, 0)=2/5$, míg az $\langle 101 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ irányokra Γ értéke $-1/10$, illetve $-3/15$, ami azt mutatja, hogy az utóbbi két irányban elhelyezkedő $\Delta V^\infty > 0$ (< 0) erősségű hibák vonzzák, míg az $\langle 100 \rangle$ irányban levők taszítják egymást.

Ez a távolságfüggés, amelyet *Eshelby* adott meg elsőként [7, 12], jól egyezik *Hardy* és *Bullough* [13, 14] rácselméleti módszerekkel történt számolásával.

A köbös kristályok jelentős része kisebb-nagyobb mértékű anizotrópiát mutat. Homogén anyagoknál a rugalmas kontinuum egyensúlyát leíró

$$c_{44}\Delta u_i + (c_{12} + c_{44})\partial_i\partial_j u_j + d\partial_{ii}u_i = -p\partial_i\delta \quad (31)$$

egyenletből határozható meg a $P_{ij} = P\delta_{ij}$ dilatációs centrum körül kialakuló elmozdulástér. Gyengén anizotrop anyagokra, amelyeknek rugalmas állandóira a

$$d = c_{11} - c_{12} - 2c_{44} \ll c_{44} \quad (32)$$

feltétel teljesül (1. táblázat), (31) megoldása d -ben elsőrendben az

$$u_i(\mathbf{r}) = \left(\frac{\Delta V^\infty}{4\pi}\right) \frac{x_i}{r^3} \left\{ 1 - \left(\frac{3d}{2c_{11}}\right) \left[1 - \left(\frac{x_i}{r}\right)^2 \right] \right\} \quad (33)$$

1. TÁBLÁZAT

Néhány köbös szerkezetű fém „ a ” rácsállandója (10^{-10} m egységben), valamint rugalmas állandói (10^{11} N/m² egységben) szobahőmérsékleten

Fém	a	c_{11}	c_{12}	c_{44}	d
Ag	4,09	1,23	0,92	0,453	-0,60
Al	4,05	1,07	0,607	0,282	-0,10
Au	4,08	1,90	1,61	0,423	-0,56
Cu	3,61	1,69	1,22	0,755	-1,04
α -Fe	2,87	2,33	1,35	1,18	-1,38
V	3,62	2,29	1,19	0,432	0,24
W	3,62	5,23	2,05	1,61	-0,04

alakban adható meg. Az anizotrópia miatt két pontszerűnek tekinthető hiba között pedig

$$E_{AB}^a = \frac{15}{8\pi} \Delta V_A^\infty \Delta V_B^\infty d \frac{\Gamma}{r^3} \quad (34)$$

nagyságú kölcsönhatási energia lép fel [11, 12, 15]. A (30) alatt megadott véges méret kölcsönhatás energiája felülmúlja az anizotrópiából származó kölcsönhatást, ha

$$\left(\frac{r}{a}\right)^2 < 0,6 \frac{c_{11}}{d_1}. \quad (35)$$

Majdnem izotrop anyagra, például az alumíniumra, ahol $d/c_{11} \cong 0,1$, (35)-ből az $r < 3a$ feltételt kapjuk. A hiba egy ilyen sugarú környezetén kívül az anizotrópiából származó kölcsönhatás jelentősebb, mint a véges méret kölcsönhatás.

3. Adiabtikus potenciál és invariánsai

Tekintsünk egy N atomból álló, stabil atomi rendszert, például egy molekulát, kristályrácsot, amelyben az egyes atomok a hőmozgás következtében ($T > 0K$) egyensúlyi helyzetük körül rezgőmozgást végeznek. Az atomok mozgása valójában az egyes atommagok lassú mozgásaként fogható fel, amelyet azonnal követ a mintegy

kétezerszer könnyebb, gyorsan mozgó elektronokból álló elektronfelhő mozgása. Ezen feltételezés az alapja az ún. „adiabatikus közelítésnek”, vagy másképpen Born—Oppenheimer-féle közelítésnek, amely ily módon veszi figyelembe az elektronok és magok mozgásának különböző jellegét. Ez az elv matematikailag azt jelenti, hogy az atomi rendszer egy, csak a magok $\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N$ helyzetvektoraitól függő, $\Phi(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N)$ potenciállal jellemezhető. Ezt a potenciált adiabatikus potenciálnak nevezzük [16, 17].

Mivel az atomi rendszer energiája nem függ a koordinátarendszer megválasztásától, ezért az adiabatikus potenciálfüggvény a tetszőlegesen választott K inerciarendszer origójának $\delta\epsilon$ eltolásával szemben invariáns. Ebből következik, hogy a K és \tilde{K} inerciarendszerekben a magkoordináták reprezentációi között az

$$\tilde{\mathbf{r}}^m = \mathbf{r}^m + \delta\epsilon, \quad m = 1, 2, \dots, N \quad (36)$$

kifejezés teremt kapcsolatot, és a Φ potenciálfüggvény így a

$$\Phi(\mathbf{r}^1 + \delta\epsilon, \mathbf{r}^2 + \delta\epsilon, \dots, \mathbf{r}^N + \delta\epsilon) - \Phi(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N) = 0 \quad (37)$$

összefüggésnek tesz eleget.

A fenti egyenlőség bármilyen $\delta\epsilon$ esetén teljesül. Ebből következik, hogy a Φ potenciálfüggvény

$$\frac{\partial \Phi}{\partial r_i^m} = \partial_{r_i^m} \Phi = \Phi_i^m, \quad m = 1, 2, \dots, N, \quad i = 1, 2, 3 \quad (38)$$

parciális deriváltjai között fennáll a

$$\sum_m \Phi_i^m = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (39)$$

vagy

$$\sum_m \Phi^m = 0 \quad (40)$$

kapcsolat, ahol $\Phi^m = (\Phi_1^m, \Phi_2^m, \Phi_3^m)$.

Tekintsük most azt az esetet, amikor a \tilde{K} rendszer a K inerciarendszer „infinitezimális” $\delta\phi$ szögű elfordulásával jön létre. Ekkor a két koordinátarendszerben a nukleusok koordinátái között fennálló összefüggés:

$$\tilde{\mathbf{r}}^m = \mathbf{r}^m + \delta\phi \times \mathbf{r}^m, \quad m = 1, 2, \dots, N. \quad (41)$$

Az adiabatikus potenciálnak így a

$$\Phi(\mathbf{r}^1 + \delta\phi \times \mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2 + \delta\phi \times \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N + \delta\phi \times \mathbf{r}^N) - \Phi(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N) = 0 \quad (42)$$

feltételt kell teljesítenie tetszőleges $\delta\phi$ esetén, ami az első deriváltakra vonatkozólag a

$$\sum_m (\mathbf{r}^m \times \Phi^m) = 0 \quad (43)$$

egyenlőség fennállását eredményezi.

A következő fejezetben látni fogjuk, hogy az m -edik atomra ható belső erőknek a nagyságát éppen $-\Phi^m$ adja meg, így a (40) és (43) összefüggések a vizsgált atomi rendszer impulzusának és impulzusmomentumának megmaradását fejezik ki, abban az esetben amikor nincsenek külső erők.

4. Harmonikus közelítés

Egy stabil atomi rendszer egyensúlyi állapotát állandó T hőmérsékleten és p nyomáson a

$$G = U + pV - TS \quad (44)$$

szabadentalpia minimuma jellemzi, ahol U a rendszer belső energiája, S az entropiája és V a térfogata. $T=0K$ esetén, ha a térfogatváltozásból származó $p dV$ tagot elhanyagoljuk, az egyensúly feltételére a

$$dG = dU = 0 \quad (45)$$

adódik. Adiabatus közelítésben $dU = d\Phi$, ami esetünkben azt jelenti, hogy

$$\Phi_i^m = 0 \quad \text{bármely } m = 1, 2, \dots, N \quad \text{és } i = 1, 2, 3$$

esetén. E fenti egyenletrendszer $3N$ darab egyenletből áll, amelyből a magok egyensúlyi állapotára jellemző $\mathbf{R}^1, \mathbf{R}^2, \dots, \mathbf{R}^N$ helyvektorok meghatározhatók. (Gyakran szükségünk lesz az \mathbf{R}^m helyvektorokból képzett $\mathbf{R} = (\mathbf{R}^1, \mathbf{R}^2, \dots, \mathbf{R}^N)$ $3N$ dimenziós vektorra, amely a rendszer egyensúlyi állapotát jellemzi.)

$T > 0K$ esetén az atomok egyensúlyi helyzetük körül rezgőmozgást végeznek. Jelölje $\mathbf{u}^m = (u_1^m, u_2^m, u_3^m)$ az m -edik magnak az egyensúlyi helyzetétől mért elmozdulásvektorát (3. ábra). A magok egyensúlyi helyzetéből történő kimozdulása során a Φ potenciál értéke $\Delta\Phi$ -vel megváltozik:

$$\Delta\Phi = \Phi(\mathbf{R}^1 + \mathbf{u}^1, \mathbf{R}^2 + \mathbf{u}^2, \dots, \mathbf{R}^N + \mathbf{u}^N) - \Phi(\mathbf{R}^1, \mathbf{R}^2, \dots, \mathbf{R}^N). \quad (47)$$

Amennyiben a termikus rezgések amplitúdója nem nagyon nagy (a kristályrácsban az amplitúdó csak az olvadásponton éri el a rácsállandó kb. $1/10$ -ét), $\Delta\Phi$ jól közelíthető az elmozdulásvektorok szerinti sorfejtésének első néhány tagjával:

$$\Delta\Phi = \sum_m \sum_i \partial_{r_i^m} \Phi(\mathbf{R}) \cdot u_i^m + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{i,j} \partial_{r_i^m} \partial_{r_j^n} \Phi(\mathbf{R}) \cdot u_i^m u_j^n + \quad (48)$$

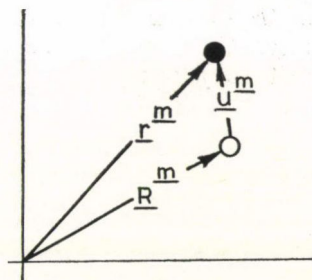
+magasabb rendű tagok.

Ha a potenciál nullszintjének válasszuk az egyensúlyi helyzethez rendelt $\Phi(\mathbf{R}) = \Phi(\mathbf{R}^1, \mathbf{R}^2, \dots, \mathbf{R}^N)$ értéket, és figyelembe vesszük, hogy egyensúlyban

$$\partial_{r_i^m} \Phi(\mathbf{R}) = \Phi_i^m = 0, \quad (49)$$

akkor kis elmozdulások esetén (48)-ban csak a kvadratikus tagot megtartva, a potenciál értékét jó közelítéssel a

$$\Delta\Phi = \Phi(\mathbf{r}^1, \mathbf{r}^2, \dots, \mathbf{r}^N) = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{i,j} \partial_{r_i^m} \partial_{r_j^n} \Phi(\mathbf{R}) \cdot u_i^m u_j^n \quad (50)$$



3. ábra. \mathbf{R}^m az m -edik mag egyensúlyi helyvektora, \mathbf{u}^m az elmozdulásvektora

kifejezés adja meg. Ezt a közelítést amelyben az u_i^m kitérések hármas, négyes stb. szorzatait tartalmazó tagokat a sorfejtésben elhanyagoljuk, harmonikus közelítésnek nevezzük.

Vezessük be a

$$\Phi_{ij}^{mn} = \partial_{r_i^m} \partial_{r_j^n} \Phi(\mathbf{R}) \quad (51)$$

jelölést, amelynek segítségével Φ a

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{i,j} u_i^m \Phi_{ij}^{mn} u_j^n = \frac{1}{2} \langle \mathbf{u}, \underline{\Phi}, \mathbf{u} \rangle \quad (52)$$

alakban írható fel, ahol

$$\mathbf{u} = (u_1^1, u_2^1, u_3^1, u_1^2, u_2^2, u_3^2, \dots, u_1^N, u_2^N, u_3^N) \quad (53)$$

a $3N$ dimenziós tér vektora. Ez a vektor jellemzi az atomi rendszer egészének elmozdulását, míg $\underline{\Phi}$ az alábbi $3N \times 3N$ -es, pozitív definit, szimmetrikus hiper-mátrixot jelöli:

$$\underline{\Phi} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} & 1 & 2 & \dots & n & \dots & N \\ \begin{bmatrix} & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & \end{bmatrix} & \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ m \\ \vdots \\ N \end{array} \end{array} \end{array}$$

A Φ_{ij}^{mn} együtthatókat csatolási paramétereknek, vagy erőállandóknak, a belőlük képezett $\underline{\Phi}$ mátrixot csatolási mátrixnak, illetve az erőállandók mátrixának nevezzük.

5. Az erőállandó mátrix, és néhány tulajdonsága

$\underline{\Phi}$ szimmetrikus volta a Φ_{ij}^{mn} erőállandók (51) alatti értelmezéséből, a parciális deriváltak felcserélhetőségéből rögtön következik:

$$\Phi_{ij}^{mn} = \partial_{r_i^m} \partial_{r_j^n} \Phi(\mathbf{R}) = \partial_{r_j^n} \partial_{r_i^m} \Phi(\mathbf{R}) = \Phi_{ji}^{nm}. \quad (55)$$

E fenti összefüggéseken kívül a mátrixelemeknek még további feltételeket is ki kell elégeíteniük, hiszen teljesülniük kell a (40) és (43) alatt megadott egyenletekből következő

$$\sum_m \Phi_{ij}^{mn} = 0, \quad n = 1, 2, \dots, N \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (56)$$

és

$$\sum_m \Phi_{ji}^{nm} R_k^m = \sum_m \Phi_{kj}^{nm} R_i^m, \quad n = 1, 2, \dots, N$$

$$i, j, k = 1, 2, 3 \quad (57)$$

összefüggéseknek is.

A továbbiakban megvizsgáljuk, hogy milyen közvetlen fizikai jelentés tulajdonítható az erőállandóknak. Jelölje F^m az atomi rendszer m -edik magjára ható külső erő nagyságát, amelynek hatására a mag egy kicsiny u^m -mel elmozdul az R^m egyensúlyi helyzetéből. Az F^1, F^2, \dots, F^N erőrendszer által végzett

$$\Delta W = \sum_m \sum_i F_i^m u_i^m \quad (58)$$

nagyságú munka a rendszer energiáját megnöveli:

$$\Delta \Phi = \Delta W, \quad (59)$$

hiszen az egyes magok kimozdultak a számukra energetikailag legkedvezőbb helyzetből. A fenti összefüggésből és (50)-ből rögtön adódik, hogy

$$F_i^m = \partial_{u_i^m}(\Delta \Phi) = \sum_n \sum_j \Phi_{ij}^{mn} u_j^n \quad (60)$$

és így az m -edik pontban az F^m külső erővel egyensúlyt tartó belső erők eredője:

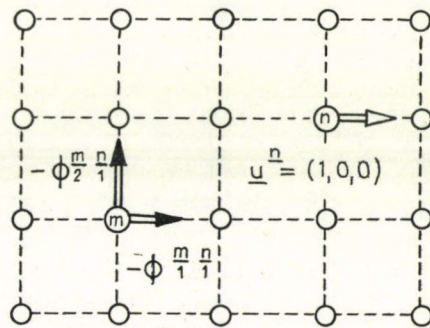
$$F_i^m|_b = - \sum_n \sum_j \Phi_{ij}^{mn} u_j^n. \quad (61)$$

Ebből az egyenletből következik, hogy ha az n -edik magot a j irányban egységnyivel kimozdítjuk, és eközben a többi mag az egyensúlyi helyzetében tartózkodik, akkor az m -edik pontban fellépő belső erő i komponensének nagysága $-\Phi_{ij}^{mn}$ (4. ábra). Az erőállandó mátrix segítségével tehát az u^m elmozdulások ismeretében megadható az egyes magokra ható belső erő nagysága, felírható a magok mozgásegyenlete, amelyekből elsősorban a rendszer dinamikai tulajdonságaira lehet következtetni.

Gyakran előfordul a fordított eset is, amikor arra van szükség, hogy adott F^1, F^2, \dots, F^N „külső erőrendszer” esetén meghatározzuk az u^1, u^2, \dots, u^N elmozdulásokat. Ennek érdekében szorozzuk meg a (60) egyenlet mindkét oldalát egy olyan \underline{G} mátrixszal, amelyre a

$$\sum_m \sum_i G_{ki}^{pm} \Phi_{ij}^{mn} = \delta_{kj}^{pn} \quad (62)$$

összefüggés teljesül, ahol $\delta_{kj}^{pn} = \delta_{pn} \delta_{kj}$ a megfelelően particionált $3N \times 3N$ -es egység-mátrix elemei. A \underline{G} mátrix, amelyet a rendszer Green-függvényének nevezünk, egy



4. ábra. Erőállandó mátrix elemeinek fizikai jelentéséhez

pozitív definit szimmetrikus mátrix, amelynek segítségével explicit módon kifejezhetők az erők ismeretében az elmozdulások:

$$u_k^p = \sum_m \sum_i G_{ki}^{pm} F_i^m. \quad (63)$$

Az eddig ismertetett tulajdonságai az erőállandó mátrixnak, illetve Green-függvénynek, tetszőleges atomi rendszerre érvényesek. A továbbiakban ezeket a fogalmakat a kristályos szilárd anyagban előforduló ponthibák tulajdonságainak vizsgálatánál fogjuk alkalmazni.

6. Ideális (hibátlan) kristály

Ahogy az előbbieken láttuk, az erőállandó mátrixnak a (55), (56) és (57) feltételeket kell teljesítenie. A hibátlan, végtelen kristály translációs szimmetriájából még egy további megkötés is adódik a mátrixelemekre vonatkozólag. Kézenfekvőnek tűnik, hogy az n -edik rácspont elmozdulásából származó, az m -edik pontban fellépő belső erő csak a rácspontok relatív elhelyezkedésétől, azaz az $\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n$ rácsvektortól függ. Ebből adódik, hogy a Φ_{ij}^{mn} erőállandókra egy hibátlan, végtelen kristály esetében teljesül a

$$\Phi_{ij}^{mn} = \Phi_{i-j}^{m-n0} \quad (64)$$

összefüggés, ahol $\mathbf{0}$ az origó helyvektora.

A másodrendű pszeudopotenciál-elmélet szerint [17, 18, 19] egy hibátlan kristály teljes energiája a

$$\Phi_0 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \varphi(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n, V) + F(V) \quad (65)$$

összefüggéssel adható meg, ahol V a kristály térfogata, $\varphi(\mathbf{r}, V)$ egy alkalmas párpotenciál, és $F(V)$ egy kristály térfogatától függő energiatag. A továbbiakban a párpotenciálról feltételezzük, hogy nem függ V -től, míg $F(V)$ -t egy V -ben lineáris függvénnyel közelítjük, így Φ_0 -ra

$$\Phi_0 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \varphi(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n) + pV \quad (66)$$

adódik. A Φ_0 potenciált a rácsállandó függvényében minimalizálva megmutatható, hogy a p nyomás jellegű tag (Cauchy-nyomás) értéke köbös szerkezetű kristályoknál kifejezhető a rugalmas állandókkal [20, 16] a

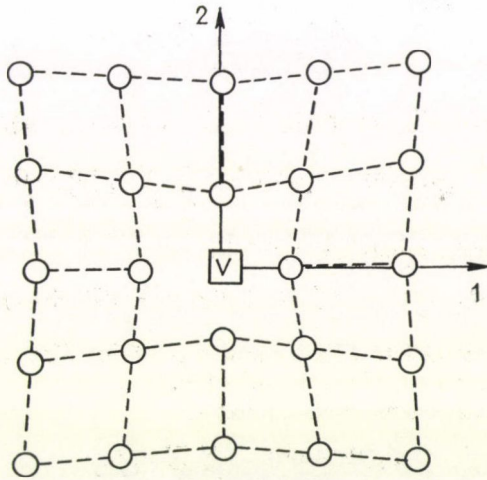
$$p = \frac{1}{2} (c_{12} - c_{44}) \quad (67)$$

alakban.

7. A hibaképződés energiája

Tételezzük fel, hogy az eredetileg hibátlan kristályban létrehozunk egy pont-hibát. A ponthiba jelenléte a kristályban felfogható úgy, hogy a hiba közvetlen módon, egy ψ párpotenciálon keresztül (lásd jelen cikksorozat 2. fejezetét) kölcsönhatásba lép a mátrixbeli atomokkal, amelyek ennek következtében elmozdulnak a hibátlan kristályban elfoglalt helyükhöz képest. A hiba körüli atomok relaxációja a kristály egész térfogatának V_F nagyságú megváltozását eredményezi. V_F -et a hiba képződési térfogatának nevezzük. A hibát tartalmazó kristály Φ_h energiáját az $\mathbf{u}^m = \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)$ elmozdulások függvényében a

$$\Phi_h = \sum_m \psi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \varphi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m - [\mathbf{R}^n + \mathbf{u}^n]) + p(V + V_F) \quad (68)$$



5. ábra. Vakancia körüli rácsstorzulás
sematikus ábrázolása

alakban adhatjuk meg, ha a ponthiba az origóban helyezkedik el (5. ábra). Így a hiba képződéséhez szükséges E_F energia nagysága:

$$E_F = \Phi_h - \Phi_0 = \sum_m \psi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \{ \varphi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m - [\mathbf{R}^n + \mathbf{u}^n]) - \varphi(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n) \} + pV_F. \quad (69)$$

Harmonikus közelítésben

$$E_F(\mathbf{u}) = \Psi(\mathbf{u}) + \frac{1}{2} \sum_{m,n} \sum_{i,j} \Phi_{ij}^{mn} u_i^m u_j^n + pV_F, \quad (70)$$

ahol

$$\Psi(\mathbf{u}) = \Psi(\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2, \dots, \mathbf{u}^N) = \sum_m \psi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m), \quad (71)$$

a ponthibától származó kötési energiajárulék. $m \neq n$ esetén Φ_{ij}^{mn} a

$$\Phi_{ij}^{mn} = \partial_{r_i^m} \partial_{r_j^n} \left[\frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \varphi(\mathbf{r}^m - \mathbf{r}^n) \right] (\mathbf{R}) = \partial_i \partial_j \varphi(\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n) \quad (72)$$

párpotenciál-függvény deriváltjaival hozható kapcsolatba, amely gömbszimmetrikus esetben $(\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(|\mathbf{r}|))$ tovább egyszerűsödik:

$$\Phi_{ij}^{mn} = - \left[\delta_{ij} \frac{\varphi'}{r} + \frac{r_i r_j}{r^2} \left(\varphi'' - \frac{\varphi'}{r} \right) \right] (\mathbf{R}^m - \mathbf{R}^n), \quad (73)$$

míg $m = n$ esetén Φ_{ij}^{mn} értéke az erőállandó mátrix elemei között fennálló (56)-os összefüggésből adható meg:

$$\Phi_{ij}^{nn} = - \sum_{\substack{m \\ m \neq n}} \Phi_{ij}^{mn}. \quad (74)$$

Az $E_F(\mathbf{u}) = E_F(\mathbf{u}^1, \mathbf{u}^2, \dots, \mathbf{u}^N)$ energiát az elmozdulások függvényében minimalizálva a

$$\partial_{u_i^m} E_F(\mathbf{u}) = \partial_{u_i^m} \Psi(\mathbf{u}) + \sum_n \sum_j \Phi_{ij}^{mn} u_j^n = 0 \quad (75)$$

egyenletrendszer adódik, amelyben szereplő

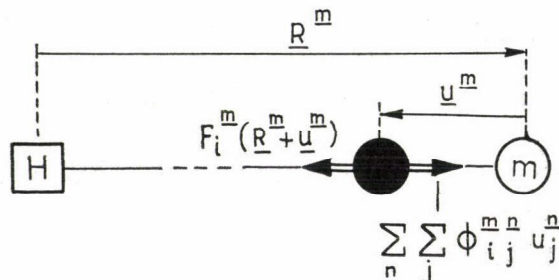
$$\partial_{u_i^m} \Psi(\mathbf{u}) = \partial_i \psi(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) = -F_i(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) \quad (76)$$

erőtag jelentése igen szemléletes. Ez ugyanis a ponthiba által az m -edik rácspontra kifejtett erő nagysága annak elmozdulása után.

Az \mathbf{u}^m elmozdulások ismeretéhez tehát az

$$F_i(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) = \sum_n \sum_j \Phi_{ij}^{mn} u_j^n \quad (77)$$

\mathbf{u}^m -ben nemlineáris egyenletrendszer megoldása szükséges (6. ábra). Fejtsük sorba az $F_i(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m)$ függvényt az \mathbf{u}_i^m elmozdulások szerint és szorozzuk meg a fenti



6. ábra. A (77) egyenlet jelentéséhez

egyenlet mindkét oldalát a hibátlan rács Green-függvényével. Az u_i^m -ben elsőrendű tagokat megtartva, a kapott egyenletrendszer:

$$u_k^p = \sum_m \sum_i G_{ki}^{pm} F_i(\mathbf{R}^m) + \sum_m \sum_i G_{ki}^{pm} \left[\sum_l \partial_l F_l(\mathbf{R}^m) u_l^m \right] \quad (78)$$

alakú, amelyet a mátrixelméletben használatos iterációs eljárásokkal lehet megoldani [21]. Ha feltételezzük, hogy

$$F_i(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m) \cong F_i(\mathbf{R}^m) \quad (79)$$

(azaz a mátrixatomok rácspontokból való kimozdulása közben nem változik meg lényegesen a ponthiba által ezekre az atomokra kifejtett erő nagysága), akkor a (77) egyenlet megoldása (nulladrendű közelítés):

$$u_k^p = u_k(\mathbf{R}^p) = \sum_m \sum_i G_{ki}^{pm} F_i(\mathbf{R}^m). \quad (80)$$

A (71) alatt definiált Ψ függvényt az elmozdulások szerint elsőrendben sorbafejtve

$$\Psi(\mathbf{u}) = \sum_m \psi(\mathbf{R}^m) + \sum_m \sum_i \partial_i \psi(\mathbf{R}^m) u_i^m \quad (81)$$

majd a képződési energiára vonatkozó (70) összefüggésbe behelyettesítve és felhasználva a (75), (76) egyenleteket, az

$$E_F = \sum_m \psi(\mathbf{R}^m) - \frac{1}{2} \sum_m \sum_i F_i(\mathbf{R}^m) u_i^m + pV_F \quad (82)$$

eredményt kapjuk. E kifejezés első tagja megadja egy „merev rácsban” a bevitt ponthiba által okozott energiaváltozást.

Pl. vakancia esetén egy atom eltávolítása a rács belsejéből a kérdéses atom és a többi közötti kölcsönhatás megszüntetését, $(\psi(\mathbf{r}) = -\varphi(\mathbf{r}))$ jelenti, ezért az ezzel járó energiaváltozás köbös kristályban a következő:

$$\Psi(0) = -\frac{1}{2} \sum_m Z_m \varphi(r_m), \quad (83)$$

ahol Z_m jelenti a vakancia m -edik koordinációs héján levő szomszédjainak a számát, r_m pedig a távolságukat.

A (82) összefüggés második tagja a rács relaxációjától származó, míg pV_F a térfogatváltozás következtében fellépő energijárulék, amelyet számításokban gyakran elhanyagolnak, annak ellenére, hogy nagysága összemérhető a többi tagéval. E rácssztatikai módszer nyomán, amelyet Matsubara [22], Kanzaki [23] és Hardy [24] alkalmaztak először a ponthibák tulajdonságainak vizsgálatára, hasonló eredmény adódott a vakanciák képződési energiájára, mint a kontinuumelméletben ((10) egyenlet).

8. Ponthiba körüli relaxáció okozta térfogatváltozás

A vakancia által okozott térfogatváltozások vizsgálatához tételezzük fel, hogy egy atomot, amely átlagosan Ω térfogatot foglal el, kiviszünk a kristály belsejéből a felületére, miközben a többi atomot rögzítettnek gondoljuk. Ennek során Ω -val nő a kristály egészének térfogata. A következő lépésben a mátrixatomok

rögzítettségének megszüntetése után, a relaxáció miatt a kristály térfogata ΔV_R -rel csökken.

Tetszőleges P_{ij} rugalmas monopólus esetén a képződési térfogatot a

$$\Delta V_R = \frac{1}{3K} \int_V x_i F_i(\mathbf{r}) dV(\mathbf{r}) \quad (84)$$

integrállal lehet megadni [7], ahol

$$F_i(\mathbf{r}) = -P_{ij} \partial_j \delta(\mathbf{r}). \quad (85)$$

Elvégezve az integrálást, eredményül a

$$\Delta V_R = \frac{P_{ii}}{3K} \quad (86)$$

összefüggést kapjuk, amely a $P_{ij} = P\delta_{ij}$ esetben, (14) felhasználásával a

$$\Delta V_R = \left(\frac{\lambda + 2\mu}{K} \right) \Delta V^\infty = \gamma \Delta V^\infty \quad (87)$$

alakra hozható.

A vakanciát tartalmazó test eredő térfogatváltozása, azaz a hiba V_F^V képződési térfogata így

$$V_F^V = \Omega + \Delta V_R = \Omega + \gamma \Delta V^\infty. \quad (88)$$

A kísérleti eredmények szerint fcc és hexagonális fémekre, $V_F^V \cong 0,5 \Omega$ (fcc fémeknél V_F^V értéke általában ennél valamivel kisebb), amelynek felhasználásával, $\gamma \cong 1/3$ -ot véve, a vakancia erősségére $\Delta V^\infty \cong -\Omega/3$ adódik.

A diszkrét rácselmélet Fourier-transzformációs technikájával Hardy vizsgálta a vakancia keletkezése során fellépő térfogatrelaxációt [25]. Gondolatmenete röviden a következő. Ha a hibát mint egy rugalmas monopólust tekintjük, a P_{ij} póluserősségek ismeretében (86)-ból megadhatjuk ΔV_R értékét. Kapcsolatot kell keresni tehát a hiba körüli, mátrixatomokra ható $F_i(\mathbf{R}^m + \mathbf{u}^m)$ erők és a P_{ij} póluserősségek között. Ennek érdekében vegyük az $F_i[\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})]$ függvényt

$$\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{R}^m \\ m}} F_i[\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})] \cdot \exp\{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\} \quad (89)$$

Fourier-transzformáltját, ahol az összegzést a kristály N számú atomjának \mathbf{R}^m helyvektorára kell elvégezni. Az N atomból álló kristályt tekintjük úgy, mint egy celláját egy végtelen szuperrácsnak, amelyben minden cella ugyanabban a pontban tartalmazza a hibát. A periodikus határfeltételek miatt, a kristály első Brillouin-zónájában az N számú független \mathbf{q}^m vektorból a $\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u})$ függvény ismeretében $F_i[\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})]$ az

$$F_i[\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})] = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q}=\mathbf{q}^m \\ m}} \Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u}) \cdot \exp\{i\mathbf{q}\mathbf{r}\} \quad (90)$$

alakban állítható elő. A \mathbf{q} hullámszámvektor kis értékei ($|\mathbf{q}| \ll 1$) mellett (89) a

$$\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = -i \sum_j \left\{ \sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{R}^m \\ m}} r_j F_j[\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})] \right\} q_j + O(q^2) \quad (91)$$

alakra hozható, ahol kihasználtuk a szimmetria miatt nyilvánvalóan fennálló

$$\sum_{\substack{\mathbf{r}=\mathbf{R}^m \\ m}} F_i[\mathbf{r}+\mathbf{u}(\mathbf{r})] = 0 \quad (92)$$

feltételt, amelynek meg kell egyeznie a kontinuumelméletből nyerhető

$$\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = \int_{\mathbf{R}^3} \left[\sum_j -P_{ij} \partial_j \delta(\mathbf{r}) \right] \exp \{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\} dV(\mathbf{r}) = -i \sum_j P_{ij} q_j \quad (93)$$

eredménnyel. Ezen utóbbi követelményből a hibát a kontinuumelméletben helyettesítő rugalmas pólus tenzorára

$$P_{ij} = \sum_m R_i^m F_i[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \quad (94)$$

adódik, amely könnyen megjegyezhető, hiszen hasonló összefüggés adja a kontinuumelméletben is a P_{ij} értékeit [12, 26]. A hiba körüli relaxáció miatt fellépő térfogatváltozás (86) alapján:

$$\Delta V_R = \frac{1}{3K} \sum_m \sum_i R_i^m F_i[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \quad (95)$$

amelyet az erő és a párpotenciálfüggvény deriváltja között fennálló

$$F_i[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] = -\partial_i \psi[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \quad (96)$$

azonosság segítségével a

$$\Delta V_R = -\frac{1}{3K} \sum_m \sum_i R_i^m \partial_i \psi[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \quad (97)$$

alakban is felírhatunk. Ez az eredmény, amelyet a rácselméletből a kontinuumelméletre való áttérés során nyertünk, megadható csupán energetikai megfontolások segítségével is [27–29]. Eredményünk teljesen általános és a fenti gondolatmenet mutatja azt az utat, amelynek segítségével rácselméleti mennyiségeket definiálhatunk a kontinuumelméleti eredményekkel való összehasonlítás során.

Elsőrendű közelítésben a vakanciák ($\psi = -\varphi$) körüli relaxáció miatti térfogatváltozás a következőképpen adható meg [25, 30]:

$$\Delta V_R = \frac{1}{3K} \sum_m \sum_i R_i^m \partial_i \varphi(\mathbf{R}^m) = -\frac{2p\Omega}{K} \quad (98)$$

ahol p a Cauchy-nyomás. Homogén, izotrop anyagokra

$$p = \frac{1}{2} (\lambda - \mu) \quad (99)$$

és így

$$\Delta V_R = -\left(\frac{\lambda - \mu}{K}\right) \Omega = -\frac{3(4\nu - 1)}{2(\nu + 1)} \Omega, \quad (100)$$

amelyből a $v=1/3$ esetén a kontinuumelméletből kapott $\Delta V_R = -0,5 \Omega$ térfogathoz közeli $\Delta V_R = -\frac{3}{8} \Omega$ érték adódik. A vakanciák képződési térfogata így

$$V_F^V = \left(1 - \frac{2p}{K}\right) \Omega, \quad (101)$$

első közelítésben független az atomok közötti potenciáltértől. (Néhány gyakori fémre feltüntettük a $\Delta V_R/\Omega$ értéket a 2. táblázatban.)

2. TÁBLÁZAT

Vakancia képződésekor fellépő $\Delta V_R/\Omega$ térfogatrelaxáció értéke, néhány fém fémekben [30]

Fém	Ag	Al	Au	Cu
$\Delta V_R/\Omega$	-0,57	-0,51	-0,73	-0,45

A ponthibák képződési térfogatával kapcsolatos, általános jellegű eredmények találhatók még a [31, 32] dolgozatokban.

9. Ponthibák közötti kölcsönhatás

A következőkben a diszkrét rácselméletet alkalmazzuk ponthibák közötti kölcsönhatás vizsgálatára.

Tekintsünk egy eredetileg hibátlan kristályt, amelybe beviszünk egy A és egy B pontszerű hibát. A két hiba együttes létrehozása során kialakult elmozdulástér, valamint a kölcsönhatási energia a következőképpen határozható meg.

A kezdetben hibátlan kristályban az A hiba megjelenése a rácspontok elmozdulását eredményezi. Ezek az $(u_i^A)^A = u_i^A(\mathbf{R}^n)$ elmozdulások az

$$u_i^A(\mathbf{R}^n) = \sum_n \sum_j G_{ij}^{mn} F_j^A[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] \quad (102)$$

egyenletből határozhatók meg, ahol G_{ij}^{mn} a hibátlan rács Green-függvénye, míg $F_j^A[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)]$ a mátrixatomok és az A ponthiba közötti kölcsönhatásból kiszámolható (76) alapján. A B hiba létrehozása során kialakuló elmozdulástér meghatározása már nehezebb, mert a kristály már tartalmazza az A hibát, és emiatt a Green-függvénye is megváltozott. Megmutatható [32, 33], hogy a hibátlan rács Φ_{ij}^{mn} erőállandó mátrixának $\Delta \Phi_{ij}^{mn}$ lokális megváltozása az A hiba bevitele során a (71) alatti $\Psi(\mathbf{u})$ függvény deriváltjaival hozható kapcsolatba

$$\tilde{\Phi}_{ij}^{mn} = \Phi_{ij}^{mn} + \Delta \Phi_{ij}^{mn}, \quad (103)$$

ahol

$$\Delta \Phi_{ij}^{mn} = \partial_{u_i^m} \partial_{u_j^n} \Psi(0). \quad (104)$$

Az A hibát tartalmazó kristály $\tilde{G} = \tilde{G}_{ij}^{mn}$ Green-függvényére az $\frac{1}{1+x} = 1 - \frac{x}{1+x}$ azonosság alkalmazása után a

$$\tilde{G} = (\Phi + \Delta \Phi)^{-1} = (\underline{E} + \underline{G} \Delta \Phi)^{-1} \underline{G} = \underline{G} - \underline{G} \Delta \Phi (\underline{E} + \underline{G} \Delta \Phi)^{-1} \underline{G} \quad (105)$$

összefüggés adódik, amelyből elsőrendű közelítésben (Born-közelítés):

$$\tilde{G} \cong \underline{G} - \underline{G} \Delta \Phi \underline{G}. \quad (106)$$

Az A és B hibák létrehozása után az elmozdulástér:

$$u_i(\mathbf{R}^m) = \sum_n \sum_j G_{ij}^{mn} F_j^A[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] + \sum_n \sum_j \tilde{G}_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)], \quad (107)$$

amely kifejthető az

$$\begin{aligned} u_i(\mathbf{R}^m) = & \sum_n \sum_j G_{ij}^{mn} F_j^A[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] + \\ & + \sum_n \sum_j G_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] + \sum_n \sum_j \Delta G_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] \end{aligned} \quad (108)$$

alakban is, ahol

$$\Delta \underline{G} = -\underline{G} \Delta \Phi \tilde{G} \cong -\underline{G} \Delta \Phi \underline{G}. \quad (109)$$

A jobb oldal harmadik tagjában, a

$$\Delta u_i(\mathbf{R}^m) = \sum_n \sum_j \Delta G_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] \quad (110)$$

elmozdulásokban jelentkezik a rácsszerkezet megváltozásából eredő hatás.

A „B” hiba által kifejtett $F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)]$ erő többletmunkája az A hiba jelenléte miatt, azaz a két hiba között fellépő kölcsönhatási energia nagysága a következő kifejezéssel adható meg:

$$E = - \sum_m \sum_i F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \cdot [u_i^A(\mathbf{R}^m) + \Delta u_i(\mathbf{R}^m)]. \quad (111)$$

Eredményük két tagra bontható, amelyben az

$$\begin{aligned} E' &= - \sum_m \sum_i F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] u_i^A(\mathbf{R}^m) = \\ &= - \sum_{m,n} \sum_{i,j} F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] G_{ij}^{mn} F_j^A[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] \end{aligned} \quad (112)$$

kifejezés az elsőrendbeli kölcsönhatási energia a két hiba között, míg az

$$\begin{aligned} E'' &= - \sum_m \sum_i F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \Delta u_i(\mathbf{R}^m) = \\ &= - \sum_{m,n} \sum_{i,j} F_i^B[\mathbf{R}^m + \mathbf{u}(\mathbf{R}^m)] \Delta G_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)] \end{aligned} \quad (113)$$

a lokális rácstorzulások miatt fellépő energia nagysága. Az utóbbit inhomogén, vagy indukált kölcsönhatásnak nevezzük.

Az indukált kölcsönhatás energiája a (109) egyenlet felhasználásával az

$$E'' = \sum_{m,n} \sum_{i,j} u_i^B(\mathbf{R}^m) \Delta \Phi_{ij}^{mn} u_j^B(\mathbf{R}^n) \quad (114)$$

alakra hozható, ahol

$$u_i^B(\mathbf{R}^m) = \sum_n \sum_j G_{ij}^{mn} F_j^B[\mathbf{R}^n + \mathbf{u}(\mathbf{R}^n)]. \quad (115)$$

Egymástól viszonylag távol levő hibák esetén az $u_i^B(\mathbf{R}^m)$ elmozdulásteret jól közelíti az

$$u_i^B(\mathbf{R}^m) = u_i^B(\mathbf{R}^{AB} + \mathbf{s}^m) \cong u_i^B(\mathbf{R}^{AB}) + \sum_k \partial_k u_i^B(\mathbf{R}^{AB}) s_k^m \quad (116)$$

sorfejtés első két tagja, ahol \mathbf{R}^{AB} az A és B hibát összekötő helyvektor, \mathbf{s}^m pedig az m -edik rácspont helyvektora az A hibától mérve. Behelyettesítve a (116) összefüggést a (114) egyenletbe, majd felhasználva az erőállandó mátrix elemei között fennálló (56) összefüggést és alkalmazva az $\varepsilon_{ik}^B = (\partial_k u_i^B + \partial_i u_k^B)/2$ jelölést:

$$E'' = \sum_{m,n} \sum_{i,j,k,l} \varepsilon_{ik}^B s_k^m \Delta \Phi_{ij}^{mn} s_l^n \varepsilon_{jl}^B, \quad (117)$$

amely a

$$\Lambda_{kijl}^A = \sum_{m,n} s_k^m \Delta \Phi_{ij}^{mn} s_l^n = \Lambda_{ikjl}^A = \Lambda_{kilj}^A = \Lambda_{jlki}^A \quad (118)$$

rugalmas polarizálhatóság tenzorának bevezetésével az

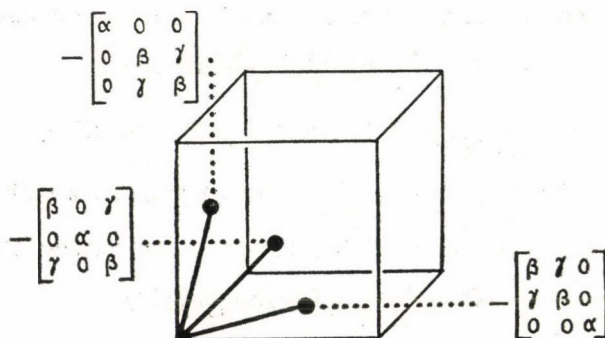
$$E'' = \sum_{i,j,k,l} \varepsilon_{ik}^B \Lambda_{ikjl}^A \varepsilon_{jl}^B \quad (119)$$

alakban is megadható. Izotrop kontinuumban a ponthiba körüli elmozdulástérből ((1) összefüggés) az $\varepsilon_{ik} \sim R^{-3}$ adódik, amelyet a (119) egyenletbe behelyettesítve, az indukált kölcsönhatás távolságfüggésére az $E'' \sim R^{-6}$ következik [33, 34], ami megegyezik a kontinuumelméletben a moduluszhatás távolságfüggésével.

10. Rácselmélet és kontinuumelmélet kapcsolata

Első szomszéd kölcsönhatás feltételezésével megmutatható, hogy fcc kristályban a Φ_{ij}^{mn} erőállandó mátrix elemei csupán 3 független állandót tartalmaznak [16, 35]. Például az $\mathbf{r}^0 = (0, 0, 0)$ és $\mathbf{r}^m = a(1, 1, 0)$ esetén (7. ábra):

$$\Phi_{ij}^{m0} = - \begin{bmatrix} \beta & \gamma & 0 \\ \gamma & \beta & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} = \Phi_{ij}(\mathbf{r}^m). \quad (120)$$



7. ábra. Közvetlen szomszéd kölcsönhatás fcc rácsban α, β, γ paraméterekkel [16]

A kristály szimmetriaoperációinak segítségével még 11, a fentihez hasonló mátrix adható meg. Az erőállandó mátrix

$$A_{ij}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \Phi_{ij}(\mathbf{r}) \exp \{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\} \quad (121)$$

Fourier-transzformáltját véve — ahol az összegzést az origóban levő atom, 12 első szomszéd atomjának helyvektorára kell elvégezni —, eredményül a

$$A_{ij}(\mathbf{q}) = 4 \begin{bmatrix} H_1 & \gamma s_1 s_2 & \gamma s_1 s_3 \\ \gamma s_2 s_1 & H_2 & \gamma s_2 s_3 \\ \gamma s_3 s_1 & \gamma s_3 s_2 & H_3 \end{bmatrix} \quad (122)$$

mátrixot kapjuk, ahol

$$H_1 = \alpha(1 - c_2 c_3) + \beta(2 - c_1 c_2 - c_1 c_3), \quad (123)$$

H_2, H_3 pedig az 1, 2, 3 indexek ciklikus permutálásával állítható elő H_1 -ből, továbbá

$$c_i = \cos(q_i a), \quad s_i = \sin(q_i a). \quad (124)$$

A $|\mathbf{q}| \ll 1$ hullámszámvektor értékekre a relaxációs térfogatváltozás vizsgálatánál alkalmazott módszerhez hasonlóan a

$$A_{ij}(\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}) = 4 \begin{bmatrix} \bar{H}_1 & \gamma q_1 q_2 a^2 & \gamma q_1 q_3 a^2 \\ \gamma q_2 q_1 a^2 & \bar{H}_2 & \gamma q_2 q_3 a^2 \\ \gamma q_3 q_1 a^2 & \gamma q_3 q_2 a^2 & \bar{H}_3 \end{bmatrix} \quad (125)$$

mátrixnak, ahol

$$\bar{H}_i = \frac{(\beta - \alpha)a^2}{2} q_i^2 + \frac{(\beta + \alpha)a^2}{2} (q_1^2 + q_2^2 + q_3^2), \quad (126)$$

meg kell egyeznie a klasszikus rugalmasságtan

$$\partial_j C_{ijkl} \partial_l u_k + f_i = 0 \quad (127)$$

alapegyenletében szereplő $C_{ijkl} \partial_j \partial_l$ operátor $C_{ijkl} q_j q_l \Omega$ Fourier-transzformáltjával. Köbös szerkezetű kristályokra

$$C_{ijkl} = c_{12} \delta_{ij} \delta_{kl} + c_{44} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + d \delta_{ijkl} \quad (128)$$

ahol

$$\delta_{ijkl} = \begin{cases} 1 & \text{ha } i = j = k = l \\ 0 & \text{egyébként.} \end{cases}$$

Ezt felhasználva

$$C_{ijkl} q_j q_l = \begin{bmatrix} q_1^2 (c_{11} - c_{44}) + |\mathbf{q}|^2 c_{44} & q_1 q_2 (c_{12} + c_{44}) & q_1 q_3 (c_{12} + c_{44}) \\ q_2 q_1 (c_{12} + c_{44}) & q_2^2 (c_{11} - c_{44}) + |\mathbf{q}|^2 c_{44} & q_2 q_3 (c_{12} + c_{44}) \\ q_3 q_1 (c_{12} + c_{44}) & q_3 q_2 (c_{12} + c_{44}) & q_3^2 (c_{11} - c_{44}) + |\mathbf{q}|^2 c_{44} \end{bmatrix}. \quad (129)$$

(125) és (129) összehasonlításából az α, β, γ paraméterekre az

$$\alpha = \frac{a(2c_{44} - c_{11})}{2}, \quad \beta = \frac{ac_{11}}{2}, \quad \gamma = \frac{a(c_{44} + c_{12})}{2} \quad (130)$$

eredményt kapjuk. A fenti összefüggések segítségével a csatolási mátrix elemeire lehet következtetni, a mérhető rugalmas állandók ismeretében.

11. Közvetlen szomszéd kölcsönhatás a rácselméletben

Heald [33] a ponthiba körül fck rácsban kialakuló elmozdulásteret vizsgálta első szomszéd kölcsönhatás feltételezésével. A hiba körüli erőtérről gömbszimmetriát tételezett fel, ezért az ezt jellemző $F_i(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ függvényt a következő alakban vette fel:

$$F_i(\mathbf{r}, \mathbf{u}) = J(\mathbf{u}) \left(\frac{r_i}{r} \right) \quad (131)$$

ahol

$$J(\mathbf{u}) = -\partial_{u_r} \psi(r + u_r) \quad (132)$$

csak az \mathbf{r} vektor abszolút értékétől függ, irányától nem (u_r a hiba első szomszéd-jainak radiális elmozdulása). Az $F_i(\mathbf{r}, \mathbf{u})$ függvényt Fourier-transzformáltja:

$$\Gamma_1(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = \sum_{\mathbf{r}} \frac{r_i}{r} J(\mathbf{u}) \exp\{-i\mathbf{q}\mathbf{r}\} = -i2\sqrt{2}J(\mathbf{u})s_1(c_2 + c_3), \quad (133)$$

(Γ_2, Γ_3 az 1, 2, 3 indexek ciklikus permutálásával állítható elő Γ_1 -ből). Ebből (124) felhasználásával kis hullámszámvektorokra a

$$\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = -i4\sqrt{2}aJ(\mathbf{u})q_i \quad (134)$$

egyenletet nyerjük, amelyet a (91), (95) összefüggésekkel összehasonlítva, az ismeretlen $J(\mathbf{u})$ függvényre

$$J(\mathbf{u}) = \frac{K\Delta V_R}{4\sqrt{2}a} \quad (135)$$

adódik. A hiba körül kialakuló elmozdulásteret általános esetben az

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \Omega_{ij}(\mathbf{q}) \Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u}) \exp\{i\mathbf{q}\mathbf{r}\} \quad (136)$$

összefüggéssel lehet megadni. Ω_{ij} a A_{ij} mátrix inverze, azaz a reciproktér Green-függvénye, amelyet a következő összefüggés határoz meg:

$$\sum_j \Omega_{ij}(\mathbf{q}) \cdot A_{jk}(\mathbf{q}) = \delta_{ik}. \quad (137)$$

A (89) és (121) összefüggésekből látható, hogy köbös szimmetriájú kristályban A_{ij} és Ω_{ij} valós elemekből áll, míg $\Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u})$ tisztán imaginárius. Ezek figyelembe-

vételével (136) a következőképpen alakítható át:

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{q}} \Omega_{ij}(\mathbf{q}) \Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{r}). \quad (138)$$

A hosszúhullámú ($\mathbf{q} \rightarrow 0$) határesetben lehetőség adódik $u_i(\mathbf{r})$ zárt alakban történő megadására. Fejtsük hatványsorba a $\Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u})$ és $\Lambda_{ij}(\mathbf{q})$ függvényeket a

$$\Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u}) = \Gamma_j^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{u}) + \Gamma_j^{(3)}(\mathbf{q}, \mathbf{u}) + \dots \quad (139)$$

és

$$\Lambda_{ij}(\mathbf{q}) = \Lambda_{ij}^{(2)}(\mathbf{q}) + \Lambda_{ij}^{(4)}(\mathbf{q}) + \dots \quad (140)$$

alakban, ahol a felső indexek a tagok q -beli rendűségét jelentik. A hatványsorok első tagjait megtartva, $u_i(\mathbf{r})$ előállításához az

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{i}{N} \sum_{\mathbf{q}} \Omega_{ij}^{(-2)}(\mathbf{q}) \Gamma_j^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{u}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{r}) \quad (141)$$

kifejezés értékét kell kiszámolni, ahol $\Omega_{ij}^{(-2)}$ a $\Lambda_{ij}^{(2)}$ inverze:

$$\underline{\underline{\Omega}}^{(-2)} = [\underline{\underline{\Lambda}}^{(2)}]^{-1}. \quad (142)$$

$\mathbf{q} \rightarrow 0$ esetén az összegzés helyettesíthető az

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\cdot) \mapsto \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{q}} (\cdot) d\mathbf{q} \quad (143)$$

integrállal, (Ω az atomtérfogatot jelöli), így eredményül az

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \Omega_{ij}^{(-2)}(\mathbf{q}) \Gamma_j^{(1)}(\mathbf{q}, \mathbf{u}) \sin(\mathbf{q}\mathbf{r}) d\mathbf{q} \quad (144)$$

adódik. $\Gamma_j(\mathbf{q}, \mathbf{u})$ -t a (134) kifejezés adja meg, míg $\Omega_{ij}^{(-2)}(\mathbf{q})$ meghatározásához bontsuk fel $\Lambda_{ij}^{(2)}(\mathbf{q})$ -t a

$$\Lambda_{ij}^{(2)}(\mathbf{q}) = \Lambda_{ij}^I(\mathbf{q}) + \Lambda_{ij}^A(\mathbf{q}) + \dots \quad (145)$$

alakban, ahol

$$\Lambda_{ij}^I(\mathbf{q}) = 2a^3 [c_{44} \delta_{ij} |\mathbf{q}|^2 + (c_{12} + c_{44}) q_i q_j], \quad (146)$$

egy c_{12} , c_{44} rugalmas állandójú, izotrop anyagra vonatkozó $\Lambda_{ij}^I(\mathbf{q})$ mátrix, $\Lambda_{ij}^A(\mathbf{q})$ pedig az anizotrópia miatt fellépő, d -vel arányos mátrix:

$$\Lambda_{ij}^A(\mathbf{q}) = 2a^3 d \begin{bmatrix} q_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & q_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & q_3^2 \end{bmatrix}. \quad (147)$$

Feltételezve, hogy $\underline{\underline{\Lambda}}^A$ majdnem nullmátrix, $\underline{\underline{\Omega}}^{(-2)}$ -re az

$$\underline{\underline{\Omega}}^{(-2)} = (\underline{\underline{\Lambda}}^I + \underline{\underline{\Lambda}}^A)^{-1} \cong (\underline{\underline{\Lambda}}^I)^{-1} - (\underline{\underline{\Lambda}}^I)^{-1} \underline{\underline{\Lambda}}^A (\underline{\underline{\Lambda}}^I)^{-1} \quad (148)$$

közelítő eredmény adódik, amely az izotrop anyag

$$\Omega_{ij}^I(\mathbf{q}) = \frac{1}{2a^3 a_{44} |\mathbf{q}|^2} \left[\delta_{ij} - \left(\frac{c_{12} + c_{44}}{c_{12} + 2c_{44}} \right) \frac{q_i q_j}{|\mathbf{q}|^2} \right] \quad (149)$$

Green-függvényével [8, 36] az

$$\underline{\underline{\Omega}}^{(-2)} \cong \underline{\underline{\Omega}}^I - \underline{\underline{\Omega}}^I \underline{\underline{\Lambda}}^A \underline{\underline{\Omega}}^I \quad (150)$$

alakra hozható. $\Omega_{ij}^{(-2)}(\mathbf{q})$ fenti alakját (144)-be visszahelyettesítve, az integrálás elvégzése után az

$$u_i(\mathbf{r}) = \frac{4\sqrt{2}aJ(u)}{4\pi c_{11}} \frac{r_i}{r^3} \left\{ 1 - \left(\frac{3d}{2c_{11}} \right) \left[1 - \left(\frac{r_i}{r} \right)^2 \right] \right\} \quad (151)$$

végeredményt kapjuk [33]. Ez az eredmény megegyezik a kontinuumelméletből nyert (33) alatti összefüggéssel.

A pont hibák közötti kölcsönhatást vizsgálva a (112) és (113) összefüggések alapján, Heald [33, 37] két egyforma hiba elsőrendű kölcsönhatásának nagyságára az

$$E' = - \frac{(4\sqrt{2}J(\mathbf{u})a)^2 a^2 \pi (1-2\nu)}{48(2\pi)^3 \mu (1-\nu)} \times \left\{ \frac{42(15-3\nu)}{(1-\nu)} \left[-\frac{3}{R^5} + \frac{5(x_1^4 + x_2^4 + x_3^4)}{R^9} \right] - \right. \\ \left. - \frac{405}{(1-\nu)} \left[-\frac{12}{R^5} + \frac{35(x_1^4 + x_2^4 + x_3^4)}{R^9} - \frac{21(x_1^6 + x_2^6 + x_3^6)}{R^{11}} \right] \right\} \quad (152)$$

kifejezést kapta. Meghatározta vakanciák esetében az indukált kölcsönhatás nagyságát is, amelyre az

$$E'' = - \frac{6\Omega(c_{12} + 3c_{44})}{R^6} \left(\frac{\Delta V^\infty}{4\pi} \right)^2 \quad (153)$$

eredmény adódott. Az E' energia a távolság ötödik hatványával fordítottan arányos, amelyet Hardy és Bullough jeleztek először a diszkrét rácselméleti vizsgálataikban [13]. ($\alpha = \beta$, $\gamma = 0$, valamint $\nu = \infty$ esetén (152)-ből kiadódik a Hardy—Bullough által megadott eredmény.) Az E'' energiára kapott összefüggést összehasonlítva a kontinuumelméletből nyert, a vakanciákra vonatkozó

$$E^m = - \frac{12V_F^V}{R^6} \left(\frac{\Delta V^\infty}{4\pi} \right)^2 M_h \quad (154)$$

kifejezéssel, megbecsülhető az M_h értéke:

$$M_h = \frac{\mu(\mu - \mu_h)}{\mu - \beta(\mu - \mu_h)} = \frac{\Omega}{2V_F^V} \frac{\mu(3-4\nu)}{(1-2\nu)} \quad (155)$$

Alumínium esetében $\mu = 2,7 \times 10^{10}$ N/m², $\Omega \cong 16 \times 10^{-24}$ cm³, $\nu \cong 1/3$, $V_F^V \cong 0,5 \Omega$ értékekkel számolva $\beta = 7/15$ és $\mu_h = -0,5 \mu$. Az $\alpha^\mu = -M_h \Omega$ rugalmas polarizálhatóság nagyságára $\alpha^\mu \cong -14$ eV adódik, amely jól egyezik a Wenzl által, kísérletileg kapott $\alpha^\mu \cong -16$ eV-os eredménnyel [38].

A fenti eredmény szerint a vakancia megjelenése során a kristályban $-\frac{3}{2} \mu$ -vel lokálisan megváltozik a μ nyírási modulus értéke.

A részletesebb számolások [16, 32] azt mutatják, hogy egy olyan kristályban, amely véletlenszerű eloszlásban tartalmaz pontszerű hibákat, és ezek c koncentrációja viszonylag alacsony, az indukált kölcsönhatásból egy

$$\sigma_{ij}^{\text{ind}} = \frac{c}{V_c} \alpha_{ijkl} e_{kl} \quad (156)$$

nagyságú belső feszültség keletkezik, ahol α_{ijkl} a rugalmas polarizálhatóság tenzora (Born-közelítésben $\alpha_{ijkl} = A_{ijkl}$), c/V_c a hibasűrűség. A kristály belsejében az egyensúly feltétele a

$$\sigma_{ij} + \sigma_{ij}^{\text{ind}} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (157)$$

alakban, illetve formálisan a

$$\sigma_{ij} = (C_{ijkl} + \Delta C_{ijkl}) \varepsilon_{kl} \quad (158)$$

módon írható fel, ahol

$$\Delta C_{ijkl} = -\frac{c}{V_c} \alpha_{ijkl}. \quad (159)$$

Vakanciákra és szubsztitúciós szennyezőkre $\alpha_{ijkl} \cong A_{ijkl}$, és a köbös kristályok rugalmas állandóinak megváltozására a

$$\frac{\Delta(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11} + 2c_{12}} = -2,64 c, \quad \frac{\Delta(c_{11} - c_{12})}{c_{11} - c_{12}} = -3,20 c, \quad \frac{\Delta c_{44}}{c_{44}} = -3,00 c \quad (160)$$

kifejezések adódnak.

Az utóbbi időkben igen sok szerző vizsgálta kísérletileg az intersticiálisok és vakanciák hatását a rugalmas állandókra, lásd pl. [39, 40]. Ezek a vizsgálatok viszonylag magas hibakonzentrációk esetén adnak megbízható eredményeket, amelyeket többnyire elektron, illetve neutronbesugárzással érnek el. A 3. táblázatban Cu és

3. TÁBLÁZAT

Neutron, illetve elektronbesugárzással keltett
Frenkel párok hatása a rugalmas állandókra

	$\frac{\Delta c_{44}}{c c_{44}}$	$\frac{\Delta(c_{11} - c_{12})}{c(c_{11} - c_{12})}$
Frenkel pár Cu [39]	-31	-15
Frenkel pár Al [40]	-27	-15

Al esetében kapott eredményeket tüntettük fel.

12. Összefoglalás

A dolgozatban a ponthibák kontinuummodelljéből származó eredmények áttekintése után a rácselméletben használatos fontosabb fogalmakat ismertettük. Alkalmazásukkal egy módszert mutattunk a ponthibák képződési energiájának képződési térfogatának meghatározására. Részletesen foglalkoztunk a hibák között fellépő kölcsönhatással, amelyet összehasonlítottunk a kontinuumelméletből adódó összefüggésekkel. A kontinuumelmélet és rácselmélet közötti kapcsolat ismeretében meghatároztuk a ponthibák körül kialakuló elmozdulásteret, valamint a hibák hatását a kristály rugalmas állandóira.

IRODALOM

1. N. F. Mott and F. R. N. Nabarro, Proc. Phys. Soc. 52, 86, 1940.
2. Kovács I. és Zsoldos L.: Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965. p. 154.
3. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 18/1, 1, 1970.
4. F. R. N. Nabarro, Proc. Roy. Soc. A175, 519, 1940.
5. M. W. Thompson: Defects and Radiation Damage in Metals, University Press, Cambridge, 1969.
6. J. D. Eshelby, Journ. Appl. Phys. 25, 255, 1954.
7. J. D. Eshelby, Solid State Phys. 3, 79, 1956.
8. M. Wadati, Physics Reports (Review Section of Physics Letters) 50, 87, 1979.
9. B. A. Bilby, Proc. Phys. Soc. A63, 191, 1950.
10. J. D. Eshelby, Ann. der Physik, 7, 116, 1958.
11. J. D. Eshelby, Acta Met. 3, 487, 1955.
12. J. D. Eshelby, Vacancies '76, The Metals Society, London, 1977. p. 3.
13. J. R. Hardy and R. Bullough, Phil. Mag. 15, 237, 1967.
14. J. R. Hardy and R. Bullough, Phil. Mag. 17, 833, 1968.
15. A. A. Szmironov: Teoria splavov vnedreniya, Nauka, Moszkva, 1979, p. 120.
16. G. Leibfried: Point Defects in Metals I, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1978.
17. I. M. Torrens: Interatomic potentials, Academic Press, New York and London, 1972.
18. W. A. Harrison: Pseudopotentials in the Theory of Metals, L. A. Benjamin Inc. Massachusetts, 1966.
19. M. W. Finnis, J. Phys. F.: Metal Phys. 4, 1645, 1974.
20. M. Born and K. Huang: Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon Press, Oxford, 1954. p. 247.
21. G. E. Forsythe és C. B. Maler: Lineáris algebrai problémák megoldása számítógéppel, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976. p. 120.
22. T. J. Matsubara, J. Phys. Soc. Japan, 7, 270, 1952.
23. H. Kanzaki, J. Physics Chem. Solids, 2, 24, 1957.
24. J. Hardy, J. Physics Chem. Solids, 15, 39, 1960.
25. J. Hardy, J. Physics Chem. Solids, 29, 2009, 1968.
26. R. K. T. Hsieh, G. Vörös and I. Kovács, Physica, 101B., 201, 1980.
27. D. E. Temkin, Sov. Phys. — Solid St. Phys. 11, 1614, 1970.
28. T. Soma, Physica, 92B, 17, 1977.
29. M. W. Finnis and M. Sachdev, J. Phys. F.: Metal Phys. 6, 965, 1976.
30. K. M. Miller and P. T. Heald, Physica Status Solidi (b), 67, 569, 1975.
31. Z. D. Popovic, J. P. Carbotte and G. R. Piercy, J. Phys. F.: Metal Phys. 4, 351, 1974.
32. P. H. Dederichs, K. Schroeder and R. Zeller: Point Defects in Metals II, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1980.
33. P. T. Heald, Vacancies 76, The Metals Society, London, 1977, p. 11.
34. J. R. Hardy and R. Bullough, Phil. Mag. 16, 405, 1967.
35. G. H. Begbie, Proc. Roy. Soc. A188, 189, 1947.
36. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 13, 181, 1965.
37. P. T. Heald, Phil. Mag. 22, 751, 1970.
38. H. Wenzl, Vacancies and Interstitials in Metals. Ed. A. Seeger et. al. North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 363.
39. L. E. Rehn, J. Holder, A. V. Graanato, R. R. Coltman, F. W. Young, Phys. Rev. B10, 349, 1974.
40. K. H. Robrock, W. Schilling, J. Phys. F.: Metal Phys. 6, 303, 1976.

2. PONTTHIBÁK ÉS EMPIRIKUS POTENCIÁLOK

S. TÓTH LÁSZLÓ

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

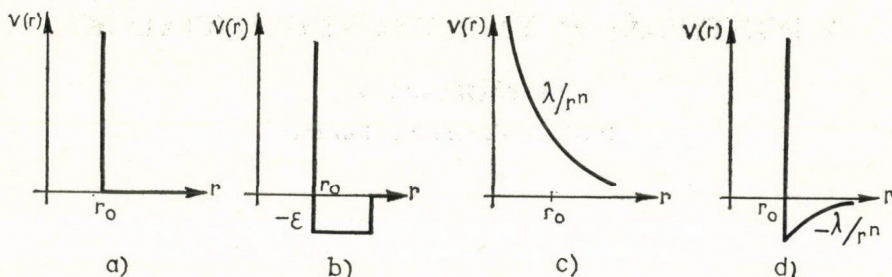
1. Bevezetés	319
2. Félempirikus potenciálok	320
2.1. Lennard—Jones-potenciál	320
2.2. Morse-potenciál	321
2.3. A Buckingham-potenciál	322
3. Empirikus potenciálok	322
3.1. Born—Mayer-potenciál	322
3.2. Johnson-potenciál	323
4. Az empirikus potenciálok paramétereinek meghatározása	325
4.1. A Lennard—Jones- és Morse-potenciál	325
4.2. Az empirikus potenciálok paramétereinek meghatározása a kristály rugalmas állandóiból	326
5. Az empirikus potenciálok számítógépes alkalmazása	328
6. Kristályhibák modellezése	329
7. A pontthibák leírása az empirikus potenciálok alapján	330
8. Összefoglalás	331
Irodalom	331

1. Bevezetés

A különféle kristályhibák közül matematikailag a pontthibák leírása a legkönnyebb. Ennek ellenére a pontthibákat jellemző paraméterek meghatározása igen nehéz. Egy matematikai modell felállításához a rácsenergia függvényt kell definiálni, amelynek felírásakor a rácsot alkotó *összes* atom térbeli pozícióját figyelembe kell venni. *Egyszerűbb módszerhez* jutunk, ha feltesszük, hogy egy kiszemelt atom a többivel csak két test kölcsönhatásban van. Az ilyenkor számításba veendő radiális erőternek mindig van potenciálja, és a probléma korlátozódhat ezen potenciál-függvény felállítására. További egyszerűsítésre ad lehetőséget, hogy ez a kölcsönhatás a távolsággal igen erősen csökken, ezért elegendő számba venni csak néhány szomszéd atomot és a határfeltételeket.

A fenti alapon lehetséges egy elméleti és egy empirikus leírás. Az elméleti leírás a kvantummechanika módszerein alapul. Ezek a számítások rendkívül komplikáltak, ezért a gyakorlatban nehezen használhatók. Bizonyos fizikai paraméterek kiszámításához sokszor célravezetőbb az egyszerűbb modelleken alapuló, ún. empirikus potenciálok használata. A legegyszerűbbeket mutatja az 1. ábra.

Két atomból álló stabil konfiguráció (molekula) esetén nyilvánvaló, hogy a két atom között bizonyos egyensúlyi távolságnál közelebb taszító, távolabb vonzó kölcsönhatásnak kell lennie. Ezért a potenciálok gyakran két tagból: egy vonzó és egy taszító kölcsönhatást leíró tagból állnak.



1. ábra. Egyszerű modellek az atomok közötti potenciálfüggvényre.
(a): „merev gömb”, (b): „négyszög”, (c): Born, (d): Sutherland $n=5-6$

2. Félempirikus potenciálok

A szilárd anyag atomjai közötti kölcsönhatást közelítőleg jellemző potenciálok megválasztása többnyire önkényes, vagy valamilyen analógián alapszik. A potenciálokban szereplő paraméterek meghatározása kísérleti adatok segítségével lehetséges. Az ilyen típusú potenciálokat félempirikus potenciáloknak nevezzük.

Jelen dolgozatban ezek közül a Lennard—Jones, a Morse, és a Buckingham-potenciálokkal foglalkozunk.

2.1. A Lennard—Jones potenciál (1924) [1]

A Lennard—Jones-potenciál egy taszító és egy vonzó tagból áll, amelyek hasonló alakúak:

$$V(r) = \lambda_n/r^n - \lambda_m/r^m.$$

Lennard és Jones ezt a potenciált Mie (1903) nyomán a semleges gázok viszkozitása hőmérsékletfüggésének értelmezésére vezette be. A vonzó tag ekkor az indukált dipól-dipól (Van der Waals-erő) kölcsönhatásból származtatható.

Az atomok közötti erőkre vonatkozó információt a gázok nyomása (p), térfogata (v) és hőmérséklete (T) közötti összefüggésből kaphatunk a következő módon. A kísérletileg mért eredményekhez általában jól illeszthető a viriál-egyenlet:

$$\frac{pv}{RT} = 1 + \frac{B(T)}{v} + \frac{C(T)}{v^2} + \frac{D(T)}{v^3} + \dots$$

ahol $B(T)$, $C(T)$ stb. a viriál-együtthatók. A viriál-együtthatók statisztikus mechanikai megfontolásokkal kapcsolatba hozhatók az atomok közötti potenciálokkal [2].

Általában az n -edik együttható az n molekula egyidejű ütközésének hatását fejezi ki. Ezért két-test kölcsönhatásoknál elegendő a második együttható figyelembevétele. A második viriál-együttható a következő alakban adható meg [2]:

$$B(T) = 2\pi N \int_0^\infty r^2 \{1 - e^{-V(r)/kT}\} dr.$$

$B(T)$ megmérhető és ha az integrandusban $V(r)$ elegendően egyszerű, az integrálás is elvégezhető. A $V(r)$ potenciál alkalmazhatósága ennek alapján megvizsgálható, mert igen sok $B(T)$ adat mérhető és $V(r)$ T -től nem függ. Lennard—Jones ezzel a módszerrel több anyagra meghatározta az n, m értékeket. A leggyakrabban használt n, m értékek: 6, 12. Ezzel:

$$V(r) = V_0 \left\{ \left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right\}.$$

Lennard és Jones ezzel a módszerrel kimutatta, hogy a felületen centrált köbös rács a legstabilabb a három lehetséges köbös rács között [1].

2.2. Morse-potenciál (1929) [3]

Morse a kétatomos molekulák vibrációs spektrumának energiaszintjei alapján adott meg potenciált. Mint ismeretes, ezek az energiaszintek a következő összefüggéssel adhatók meg:

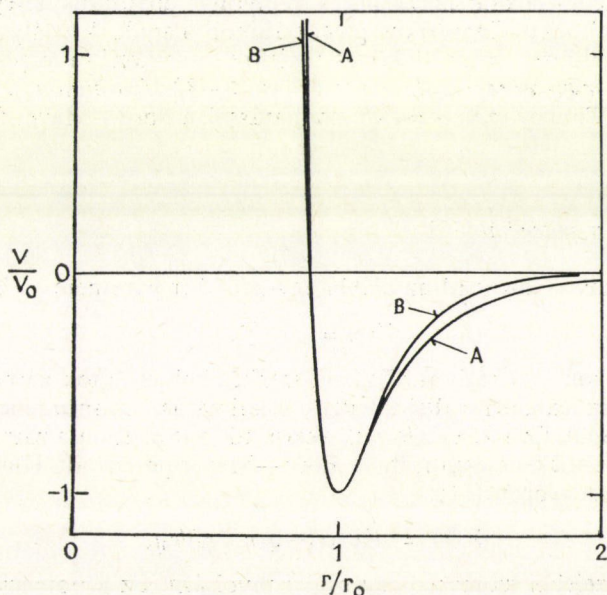
$$W(n) = -D + \hbar\omega_0 \left\{ \left(n + \frac{1}{2} \right) - x \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \right\},$$

ahol

$$x = \hbar\omega_0/4D.$$

Ezt felhasználva a $V(r)$ potenciált a következő feltételek mellett definiálta:

1. $V(r) \rightarrow 0$, ha $r \rightarrow \infty$,
2. $V(r)$ -nek minimuma van egy r_0 távolságnál,
3. $V(r) \rightarrow \infty$, ha $r \rightarrow 0$,
4. $V(r) = W(n)$, a megfelelő pontokban.



2. ábra. A Lenard—Jones (6—12) (A) és a Morse-potenciál (B)

Ezek a feltételek kielégíthetők a következő kifejezéssel:

$$V(r) = De^{-2\alpha(r-r_0)} - 2De^{-\alpha(r-r_0)}.$$

E potenciál lényeges előnye, hogy az exponenciális kifejezések miatt matematikailag könnyen kezelhető.

A Lennard—Jones (6—12) és a Morse-potenciál menetét a 2. ábra mutatja.

Fontos megjegyezni, hogy ebben a kifejezésben r_0 egy illesztő paraméter és egy kristályban nem esik egybe a legközelebbi szomszédok távolságával. A Morse-potenciált *Girifalco* és *Weizer* eredményesen alkalmazta köbös fémekre [4].

2.3. A Buckingham-potenciál [5]

Ez a potenciál $1/r^n$ alakú tagokkal veszi figyelembe az indukált dipól-dipól és kvadrupól-kvadrupól kölcsönhatásokat, míg a taszítóerőt egy exponenciális tag fejezi ki, azaz

$$V(r) = Ae^{-Br} - \lambda/r^6 - \lambda'/r^8.$$

A Buckingham-potenciált szokás „hibrid”-potenciálnak is nevezni, mivel exponenciális és hatványfüggvény keveréke. Emiatt matematikailag nehezen kezelhető, bár elméleti szempontból sokkal realisztikusabb, mint az előzők.

3. Empirikus potenciálok

A számítógépek alkalmazása óta a bonyolult analitikus kifejezésekkel való számolás könnyebb lett. Empirikus potenciálokon alapuló kristályhiba vizsgálatokat elsősorban felületen centrált köbös fémekre vonatkozóan végeztek (*Seeger és Mann, Gibson és munkatársai, Johnson és Brown* [6—8]) *Huntington és Seitz* (1942) [9] munkái alapján. Többnyire két-test kölcsönhatással, a Born—Mayer-féle potenciállal dolgoztak.

3.1. Born—Mayer-potenciál [10]

A Born—Mayer-potenciál az alábbi egyszerű két paraméteres kifejezés:

$$V(r) = Ae^{-Br}.$$

Ezt a potenciált ionos kristályokra alkalmazták, ahol az ionok zárt külső héjakkal rendelkeznek. Az exponenciális kifejezés alkalmazása kvantummechanikai megfontolásokon alapul. Ez a kifejezés csak akkor ad jó leírást, ha a zárt héjak csak kis-mértékben lapolhatják át egymást. A Born—Mayer-potenciált *Huntington*-módosította a következőképpen [11]:

$$V(r) = A' \exp \{-\varrho(r-r_0)/r_0\},$$

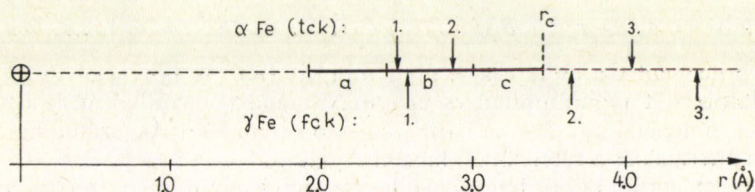
ahol r_0 a legközelebbi szomszéd egyensúlyi távolsága. Ez a potenciál széleskörűen alkalmazható a kristályrácsok leírására.

A Born—Mayer-potenciállal felületen centrált köbös fémeknél elegendő az első szomszéd hatását számba venni (a második szomszédok távolsága $r_2 = \sqrt{2}r_1$). A rugalmas állandók és az atomok kölcsönhatási potenciálja közötti összefüggés ebben az esetben az első szomszéd távolságánál vett hely szerinti első és második deriváltakat tartalmazza, és nem túl nehéz kapcsolatba hozni a rugalmas állandókat a potenciál paramétereivel pl. Cu esetén.

Tércentrált köbös rácsok (tck) esetén, amikor $r_2 \cong 1,15 r_1$, nem hanyagolható el a második szomszéd hatása, ezért pl. α vas esetén a Born—Mayer-potenciállal nem illeszthetők a rugalmas állandók a kölcsönhatási potenciálhoz. Erginsoy és munkatársai [12] úgy illesztették a rugalmas állandókat, hogy a Born—Mayer-potenciált használták az $r \ll 0,78 r_1$, a Girifalco és Weizer-féle módosított Morse-potenciált [4] a $0,78 r_1 \lesssim r \leq 1,15 r_1$, és végül a Morse-potenciált szorozva, egy alkalmas redukáló tényezővel az $1,15 r_1 \lesssim r \leq 1,44 r_1$ közötti tartományokban, továbbá a potenciált nullának vették az $r \gtrsim 1,44 r_1$ helyeken. (A harmadik szomszéd távolsága tck rácsban $r_3 \cong 1,63 r_1$.) Ez a redukálás önkényesen felvett paraméterekkel történt.

3.2. Johnson-potenciál [13]

Johnson a szilárd test atomjai közötti távolságot több szakaszra osztotta és ezeken belül egy-egy harmadfokú polinommal közelítette a kölcsönhatási potenciált. Ezeket a tartományokat Fe esetében a 3. ábra mutatja (a, b, c). A c szakaszt úgy választotta meg, hogy végpontja (r_c) α Fe esetén éppen a második és harmadik szomszéd közötti szakasz felezőpontjába essen. A b és c szakaszok potenciál-függvényeinek paramétereit úgy határozta meg, hogy r_c értékénél a potenciálnak zéruspontja legyen. Az $r > r_c$ értékekre a számítások során a kölcsönhatási potenciált nullának kell tekinteni (r_c a hatótávolságot jelöli). Így γ Fe esetén a rácsenergia kiszámolásához elegendő számba venni az első szomszéd hatását, míg α Fe-nál a második szomszédig kell elmenni. Ezzel az empirikus potenciállal sikerült az α Fe esetére az előző szakaszban vázolt nehézségeket feloldani.

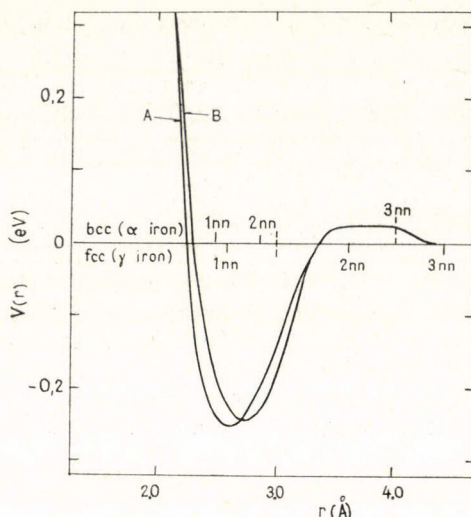


3. ábra. A Johnson-féle empirikus potenciál határoló szakaszai Fe esetén (a, b, c). A \oplus jel a kristályban elhelyezkedő atom középpontját jelöli. Az ábrára bejelöltük az α , ill. γ Fe esetére a legközelebbi szomszédok pozícióit

A Johnson-potenciál tehát három teljesen hasonló szerkezetű harmadfokú függvényből áll:

$$V(r) = A_i(r - B_i)^3 + C_i r + D_i, \quad i = 1, 2, 3.$$

Johnson Fe és V esetére határozta meg a teljes potenciált leíró 12 paramétert. A Fe potenciálgörbáját a 4. ábra mutatja (A).



4. ábra. A Johnson-féle empirikus potenciál α Fe-ra (A) és az Englert és munkatársai-féle Cu esetén (B)

Johnson használta ezt a potenciált az intersticiálisok és a vakanciák különböző konfigurációinak elemzéséhez α -vas esetén, számítógépes eljárással. Később kimutatta, hogy sok esetben az eredmények r_c értékére nagyon érzékenyek. Ennek oka lehet, hogy ez a potenciál r_c közelében túl gyorsan tart zérushoz. A rövid hatótávolság miatt ezzel nem lehet pl. a rétegződési hibák energiáját sem kiszámítani, mivel ahhoz legalább a harmadik szomszéd távolságáig terjedő potenciál szükséges.

Az előző technikát fejlesztették tovább Englert és munkatársai [14] Fe és Cu esetére. Ők 10 db köbös egyenletből rakták össze a potenciált (spline function):

$$V(r) = A_k(r-r_k)^3 + B_k(r-r_k)^2 + C_k(r-r_k) + D_k, \quad k = 1, \dots, 10.$$

Az eredő potenciált Cu esetére a 4. ábra mutatja (B). A potenciál Fe esetén még komplikáltabb, két minimummal és egy maximummal a nulla energiaszint alatt. Mivel ez a potenciál egészen a harmadik szomszédig terjed, számolhatók ebből a vakancia energiák és a rétegződési hiba energiák is.

Sok felületcentrált köbös fém esetén, ha csak az első szomszédig terjedő potenciált alkalmazunk, a rugalmas állandók a potenciállal nem illeszthetők, függetlenül azok formájától. Ezért további szomszédokig kell elmenni. Ez viszont elbonyolítja a potenciált és a paraméterek száma nagyon elszaporodik.

Ionos kristályra (LiH) Johnson és Willson [15] nem centrális tag felvételével tudta csak illeszteni a rugalmas állandókat a kölcsönhatási potenciálhoz.

4. Az empirikus potenciálok paramétereinek meghatározása

4.1. A Lennard—Jones- és Morse-potenciál

A kristály teljes energiája felírható mint valamennyi atomnak az összes többivel alkotott kölcsönhatási energiájának összege. Például a Morse-potenciál esetén a teljes energia:

$$\Phi = \frac{N}{2} \Phi_0 \sum_j \left[\exp \left\{ -2\alpha \left(\frac{r_j}{r_0} - 1 \right) \right\} - 2 \exp \left\{ -\alpha \left(\frac{r_j}{r_0} - 1 \right) \right\} \right], \quad (1)$$

ahol r_j a távolság a kiválasztott és a j -edik atom között, N a rácsban az atomok száma.

Ha a rácsállandó a , r_j felírható így:

$$r_j = M_j a.$$

Ezt behelyettesítve a teljes energia a szerinti első és második deriváltja:

$$\frac{d\Phi}{da} = -\frac{1}{r_0} M \Phi_0 \alpha e^\alpha \left\{ e^\alpha \sum_j M_j \exp \left(-2\alpha M_j \frac{a}{r_0} \right) - \sum_j M_j \exp \left(-\alpha M_j \frac{a}{r_0} \right) \right\}, \quad (2)$$

$$\frac{d^2\Phi}{da^2} = \frac{1}{r_0^2} N \Phi_0 \alpha^2 e^\alpha \left\{ 2e^\alpha \sum_j M_j^2 \exp \left(-2\alpha M_j \frac{a}{r_0} \right) - \sum_j M_j^2 \exp \left(-\alpha M_j \frac{a}{r_0} \right) \right\}. \quad (3)$$

Az egyensúlyi helyzet valamilyen a_0 kísérletileg mérhető rácsállandónál valósul meg, ekkor az első derivált nulla:

$$0 = e^\alpha \sum_j M_j \exp \left(-2\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right) - \sum_j M_j \exp \left(-\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right). \quad (4)$$

További kísérletileg mérhető paraméter az egy atomra jutó kohéziós energia:

$$E_c = \varphi_0 e^\alpha \left\{ \frac{1}{2} e^\alpha \sum_j \exp \left(-2\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right) - \sum_j \exp \left(-\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right) \right\}. \quad (5)$$

Újabb összefüggést nyerhetünk a kompressziómodulus mérésével:

$$B = v \left(\frac{d^2\varphi}{dv^2} \right) \Big|_{v_0} = (1/9cNa) (d^2\varphi/da^2) \Big|_{a_0},$$

ahol $c = \frac{1}{2}$ tércentrált köbös és $c = \frac{1}{4}$ felületcentrált köbös fém esetén. Ebbe az összefüggésbe a második deriváltat (3) behelyettesítve:

$$B = \frac{\varphi_0 \alpha^2 e^\alpha}{9cr_0^2 a_0} \left\{ 2e^\alpha \sum_j M_j^2 \exp \left(-2\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right) - \sum_j M_j^2 \exp \left(-\alpha M_j \frac{a_0}{r_0} \right) \right\}. \quad (6)$$

A (4), (5), (6) összefüggések alapján a Morse-potenciált leíró 3 paraméter, a φ_0 , r_0 és α meghatározható. Az összefüggésekben szereplő szummákat számítógéppel

határozzák meg. Girifalco és Weizer a (4)–(6) egyenletek alapján hat felületcentrált fém (Pb, Ag, Ni, Al, Cu) és 10 tércentrált köbös fém esetén (Sr, Mo, W, Cr, Fe, Ba, K, Na, Cs, Rb) határozták meg a Morse-potenciál paramétereit [4].

Egy adott ponthiba rácsmodelljének számításánál a Lennard–Jones és Morse-potenciálok használatának előnye, hogy egyensúlyban kizárólag az ezen potenciálokból származó erők működnek és ezért a határfeltételek egyszerűek. Hátrány azonban az, hogy ezek a potenciálok hosszú hatótávolságúak és a rács-összegek hosszadalmas számításának elkerülésére a potenciál hatótávolságát rendszerint önkényesen rövidíteni kell.

4.2. Az empirikus potenciálok paramétereinek meghatározása a kristály rugalmas állandóiból

Általánosan használt feltevés, hogy egyféle atomot tartalmazó kristály teljes energiája két tag összegeként írható fel:

$$E = N_a E_b + N_L E_v,$$

ahol E_b egy atom kötési energiája, N_a az atomok száma, E_v egy deformálatlan rácshelyre jutó térfogatfüggő energia, N_L a deformálatlan rácshelyek száma.

A teljes rácsenergia meghatározásánál Johnson a rácshibák által okozott deformációkban tárolt energiát a következőképpen veszi figyelembe [16]:

$$E = \frac{1}{2\Omega_0} \sum_m \Phi(\mathbf{r}^m) + \sum_q P_q \left(\frac{v}{v_0} \right)^q. \quad (7)$$

Ebben az összefüggésben Ω_0 a deformálatlan atomi térfogat, $\Phi(\mathbf{r}^m)$ a potenciális energia függvény két, egymástól \mathbf{r}^m távolságra levő atom között. P_q egy konstans együttható, v a deformált, v_0 pedig a deformálatlan térfogat. Az összeg második tagja egy, a deformált térfogat szerinti sorfejtés.

A teljes rácsenergia térfogatfüggő energiatagjának egy másik formáját használta Baskes és Melius [17]:

$$E_v = \frac{v}{v_0} \sum_q \frac{p_q}{q!} \left(\frac{\Delta v}{v_0} \right)^q, \quad (8)$$

ahol $\Delta v = v - v_0$ a rácshibák jelenlétéből származó térfogatváltozás. A (7) összefüggésbeli P_q és a (8) összefüggésben szereplő p_q konstansok között egyszerű összefüggések vannak:

$$P_1 = p_0 + \frac{1}{2} p_2, \quad P_2 = -p_2, \quad P_3 = \frac{1}{2} p_2, \quad (p_1 = 0). \quad (9)$$

Ezen összefüggések levezetéséhez azt használták fel, hogy a térfogatfüggő energiatag ugyanannyi, ha egy tökéletes N_a atomot tartalmazó rácsban létrehozunk egyetlen vakanciát, mintha egy tökéletes $N_a + 1$ atomból álló rácsból egy atomot eltávolítva hozunk létre egy vakanciát. A rácsot alkotó atomok nagy száma miatt ($\sim 6 \times 10^{23}$) a (8) összefüggésben elegendő $q=2$ -ig szummázni.

A (9) összefüggések alapján *Baskes* és *Melius* a térfogatfüggő energiatagra a következő összefüggést kapta:

$$E_v = \Omega_0(v/v_0) \left[p_0 + \frac{1}{2} p_2 (\Delta v/v_0)^2 \right].$$

Egyensúlyban az E energia \mathbf{r}^m szerinti parciális deriváltja nulla. Ennek felhasználásával a C_{11} , C_{12} és C_{14} rugalmas állandók:

$$\begin{aligned} C_{11} &= B_{11} - p_0 + p_2, \\ C_{12} &= B_{12} + p_0 + p_2, \\ C_{44} &= B_{12} - p_0, \end{aligned} \quad (10)$$

ahol

$$B_{1i} = \frac{1}{2\Omega_0} \sum_m \left(\frac{1}{a^m} \right)^2 \left(\Phi_m'' - \frac{\Phi_m'}{a^m} \right) (a_1^m)^2 (a_i^m)^2, \quad (i = 1, 2).$$

Ebben az összefüggésben a^m jelöli az atomoknak a kiválasztott kezdőponttól való távolságát, a_1^m és a_2^m a meghatározott 1 és 2-es jelű irányokban vett vetületeket jelenti. Φ_m' és Φ_m'' pedig a potenciál első, illetve második deriváltja az a^m -nak megfelelő helyeken. A (10) összefüggésben szereplő három rugalmassági állandó a kompresszió modulus $\left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \right)$, illetve a nyírási modulusok mérésével ($C_{11} - C_{12}$, C_{44})

határozható meg. Ezek ismeretében a (10) összefüggés alapján a vizsgált empirikus potenciál első, illetve második deriváltjai határozhatóak meg különböző egyensúlyi távolságok esetére. A második derivált miatt célszerű az empirikus potenciálokat harmadfokú polinomokból összeállítani, mivel ilyenkor a második derivált állandó és egyben a potenciál egyik paramétere is.

Meg kell jegyezni, hogy a paraméterek meghatározásánál figyelembe kell venni azt, hogy a kristály rugalmas deformálásánál nem csak az ion-ion közötti taszítás működik, hanem a vezetési elektronok is járulékot adnak. Ez pedig a legtöbbször nem is hanyagolható el. Ha feltesszük, hogy a vezetési elektronok jó közelítéssel szabadok, akkor a rugalmassági modulusban jelentkező járulékok leválasztható. Példaképpen tekintsük az alábbi táblázatot, amely a Born—Mayer-potenciál paramétereinek meghatározásánál tapasztalt ion-ion és elektron járulékokat mutatja a rugalmassági modulusban, Cu esetén.

I. TÁBLÁZAT

Az elektrongáz és az ion-ion taszítást kifejező tagok a kísérletileg mért rugalmassági modulusokban Cu esetén. Az adatok 10^5 MPa egységben értendők

	$\frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$	C_{44}	$C_{11} - C_{12}$
Kísérletileg mért érték	14,9	8,2	5,1
Elektron járuléka	4,3	2,6	0,6
Ion-ion tag	10,6	5,6	4,5

Mivel az atomok közötti potenciál az atomok közötti kölcsönhatást jellemzi, az atomok pedig a rácshoz rögzítettek, ezért a kölcsönhatások a rács mint egész elforgatásával szintén szinkronban elfordulnak. Nem centrális empirikus potenciál esetén viszont van kitüntetett irány, és ezért a rács tiszta elforgatásánál a nem centrális kölcsönhatások működnek. Ez azt jelenti, hogy a nem centrális kölcsönhatások elvileg nem használhatók olyan jelenségek leírásánál, amelyek a rács forgatásra invariánsak.

5. Az empirikus potenciálok számítógépes alkalmazása

Ha egy adott kezdeti atomi elrendezés nem egyensúlyi állapothoz tartozik, akkor az atomok között működő potenciál ismeretében bármely atom esetén meghatározható az atomra ható eredő erő. Ezek az erők az egész struktúrát megváltoztatják, közelítve az egyensúlyi konfigurációhoz. Általában nagyszámú atomot kell számbavenni, mert csak így biztosíthatók a megfelelő határfeltételek. Ezért igen elterjedt módszer a rácshibák leírásánál a számítógép használata.

Az i -edik és a j -edik atom közötti erő a potenciál negatív gradiense:

$$\mathbf{F}_{ij} = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_{ij}}.$$

Az eredő erő a j indexnek megfelelő vektori összeg. Egy elemi konfiguráció változás kiszámításánál a következő lépéseket kell sorba venni:

1. minden atomra kiszámítják az eredő \mathbf{F}_i erőt;
 2. egy elemi Δt időegységgel továbblépve kiszámítják az új sebesség- és helyvektorokat;
 3. az atomokat áthelyezik az új pozícióba;
 4. az energiamegmaradás törvényének alkalmazásával ellenőrzik az új helyzetet.
- A dinamikus modellek esetében az időegység általában 10^{-14} , 10^{-15} sec.

Az elemi lépések száma attól függ, hogy mennyi a potenciál hatótávolsága, vagy attól, hogy milyen távolságnál hanyagolható el a potenciál a közvetlen szomszédok közötti potenciálhoz képest. A hatótávolság redukálása nyilván maga után vonja a pontosság csökkenését is.

Véges határokkal rendelkező konfiguráció esetén olyan határfeltételt kell felvenni, amely az elrendezésen kívüli kristályrác hatását szimulálja. Ez a határfeltétel a vizsgált probléma természetétől függ. Pl. ha a kristályrácot alkotó atomoknak a termikus energia hatására létrejövő dinamikáját vizsgálják, periodikus határfeltételt használnak. Ekkor az összenergia időben állandó marad. De pl., ha besugárzás hatását számolják, az energiát nem lehet egy kis térrészre korlátozni. Ilyenkor az energiadisszipáció meghatározásához a legjobb módszer a határokon elhelyezkedő atomoknál egyrészt olyan rugalmas erőkkel számolni, amelyek a külső szomszédokkal való kölcsönhatást reprezentálják, másrészt felvenni egy sebességtől függő viszkozus erőt, amelynek segítségével az energia egy része a rendszerből disszipálódhat.

6. Kristályhibák modellezése

A kristályhibák modellezésének egyik célja meghatározni a hiba körüli atomi elrendezést, vagyis a rács relaxációját, a másik fontos feladat a hibához tartozó potenciális energia kiszámítása. Ez utóbbi a hibakeltés energiája. A gyakorlat szempontjából igen fontos probléma még a mozgási aktiválási energia meghatározása is. Ebben a fejezetben a ponthibák számítógépes modellezésének lényeges vonásait tárgyaljuk.

A ponthiba körül a kristályt koncentrikus térfogatokra osztják. A legbelső térfogatban az atomokat olyan pozíciókba helyezik, hogy a rendszer potenciális energiája minimális legyen. Ez az egyensúlyi helyzet. Ennek meghatározása iterációs eljárással történik. Az iteráció kétféle lehet. Vagy egy kiválasztott atomot mozgatnak, megkeresve a legkisebb energiájú helyzetét, és ezt valamennyi atomra többszöri ciklusban végrehajtják, vagy egyszerre mozgatják az összes atomot az egyensúlyi helyzet felé. Ezen a relaxált térfogaton kívül az atomok vagy a rácspontokban vannak, vagy a hiba által meghatározott rugalmas kényszernek megfelelően az egyensúlyi helyzetüktől kissé elmozdulva helyezkednek el. A legkülső tartományra vonatkozóan néhány esetben egyszerűen felteszik, hogy az egy rugalmas kontinuum. A ponthiba mozgási aktiválási energiáját a hiba mesterséges mozgásával a rács relaxációjából határozzák meg. A ponthiba két egyensúlyi helyzet között instabilis közbülső helyzetben, az úgynevezett „nyeregponthban” helyezkedhet el. Egy stabilis és egy nyeregponth helyzet közötti rács-relaxáció különbség a ponthiba mozgási aktiválási energiája. Ez egy sztatikus jellegű módszer.

A relaxáció azonban dinamikus folyamat. Először *Gibson és munkatársai* [18] alkalmaztak egy kvázi-dinamikus módszert. A kiinduló helyzetet úgy vették, hogy minden atom a neki megfelelő deformálatlan rácspontban helyezkedik el, középen a ponthibával. Ezután az előző pontban leírt számítógépes eljárással követték az atomok mozgását. A szükséges nagyszámú Δt időlépés csökkentésére az atomok mozgását mesterségesen gyengítették. A minimális energiájú helyzetben pedig sebességüket nullával tették egyenlővé.

A ponthiba modellezés jelenlegi módszereinek több megoldatlan problémája van. Az egyik probléma az, hogy vajon a tökéletes rács alapján meghatározott atomok közötti potenciál alkalmazható-e a rácshibák közvetlen szomszédságában is. Nem bizonyos ugyanis, hogy a használatos pár-potenciálok paraméterei individuális atomokra alkalmazva ugyanazok a rácshibák környezetében is, mint a tökéletes rácsban. Ezért előnyös olyan empirikus potenciálok használata, amelyeknek paraméterei sokféle kísérleti jelenséghez illeszthetők. Ilyenek az összetett polinomiális empirikus potenciálok, pl. a Johnson-potenciál, vagy az *Englert és munkatársai* által alkalmazott „spline function”.

Egy másik alapvető probléma az, hogy a sztatikus módszereknél először csak a ponthiba mozog, utána relaxál a rács, holott a ponthiba mozgás a környezetben levő valamennyi atom egyidejű mozgása mellett valósul meg.

7. A ponthibák leírása az empirikus potenciálok alapján

Az irodalomban eddig megjelent eredményeket röviden a következőképpen jellemezhetjük. A különféle potenciálokkal számolt ponthiba energiák lényegesen eltérhetnek egymástól. A tisztán taszító kétfest kölcsönhatások alapján végzett vizsgálatokban pl. csak mérsékelt megegyezés található a számolt és mért vakancia tulajdonságok között. A nagy hatótávolságú, lassan lecsengő (oszcilláló) potenciálok pedig túlságosan kicsiny divakancia aktiválási energiákra vezetnek fcc fémek esetében. Az empirikus potenciálok használata esetén az fcc divakancia nyeregponjtja lényegesen különbözik a rácsban a legközelebbi stabil helyzet konfigurációjától. Mozgási aktiválási energiájuk alacsonyabb, mint a monovakanciáké. A bcc divakanciák mozgása parciális disszociációval valósul meg. Egy disszociációs lépés hasonló két monovakancia mozgásához, ezért a mono és divakancia energiák bcc fémek esetében közelálló értékek. A különféle ponthiba típusok energiáit fcc fémekre a II. táblázat tartalmazza.

II. TÁBLÁZAT

Fcc fémekre számolt, ill. mért ponthiba-energiák. Az egységek eV-ban értendők.

A nem zárójeles számértékek a *Baskes* és *Melius* [17] által használt empirikus potenciál alapján számolt eredmények, a zárójelben jelzett adatok pedig kísérleti eredmények. A kisbetűk

a forrásmunkát jelölik: *a*: [19], *b*: [20], *c*: [22], *d*: [23], *e*: [21], *f*: [24], *g*: [25].

E_{ii}^I : $P_{11} - P_{12}$, ill. E_{ii}^M az intersticiális képződési energia, az anizotrópia, ill. a mozgási aktiválási energia. E_{fp} a Frankel-pár keltési energia, E_{2v}^B és E_{2v}^M a divakancia kötési, ill. mozgási aktiválási energia. E_{He} , E_{He}^M és E_{Hev}^B a hélium képződési, mozgási aktiválási, illetve kötési energiája egy vakanciához

	Ni	Au	Ag	Pt	Pd	Cu	Al
E_{ii}^I	4,90	3,70	3,11	6,42	4,93	3,46	2,50
$P_{11} - P_{12}$	5,15	2,93	4,11	2,72	4,69	3,54	0,88 (1,1 ± 0,3) (a)
E_{ii}^M	0,24 (0,15) (b)	0,08	0,13	0,15 (0,06) (b)	0,19	0,13 (0,12) (b)	0,07 (0,12) (b)
E_{fp}	6,31	4,68	4,21	7,90	6,34	4,61	3,21
E_{2v}^B	0,44 (0,33) (c)	0,43 (0,7) (d)	0,30 (0,38) (e)	0,55 (0,40) (e)	0,40	0,35 (0,12) (f)	0,28 (0,25) (f)
E_{2v}^M	1,17 (0,83) (c)	0,78 (0,71) (e)	0,61 (0,57) (e)	1,06 (1,1) (e)	1,05	0,72 (0,71) (e)	0,45 (0,42) (e)
E_{He}^F	4,02	1,60	1,32	2,60	2,18	1,93	1,32
E_{He}^M	0,66	0,72	0,65	1,13	0,94	0,63	0,33
E_{Hev}^B	2,63 (2,1) (g)	1,58	1,32	2,48	2,10	2,13	1,22

Az irodalomban kétféle kölcsönhatási modell ismeretes. Az egyik módszernél (uniform dilatation method) a potenciál a végtelenben zérushoz tart, a másikonál pedig állandó elektronsűrűséggel számolnak (constant volume method). Az előző paramétereinek meghatározásánál rendszerint mérni kell a rácsállandót és a rugalmas állandókat, míg az utóbbi esetében egy effektív potenciál kapható, a pszeudopotenciál felhasználásával. Az azonos dilatációs módszer esetében definiálható egy úgynevezett „szellem-kötési energia” is („ghost” bond), amely a vakancia és a szomszédos atom közötti kötési energia. Ez nyilván mindig negatív. A vakanciák szellemkötési energiája a kristálystruktúrától függetlenül 0,35-szöröse a rácsbeli atomok kötési energiájának [16].

Az intersticiálisokra vonatkozóan a legérdekesebb eredmények a split konfigurációkra vonatkoznak. (A lehetséges split-konfigurációkat l. pl. [27]-ben.) A tetraéderes és oktaéderes split konfiguráció úgy mozdulhat el, ha a tetraéder vagy oktaéder közepére ugrik egy atom. Az eredmények szerint egy-egy alacsony aktiválási energiájú mozgási út lehetséges mindkét esetben. Az átlós elrendezésű crawdion esetében is lehetséges egy alacsony aktiválási energiájú elmozdulás. Érdekes kérdés, hogy a különböző split konfigurációk egyetlen rotációval átfordulhatnak-e egymásba. Erre vonatkozóan több számolás történt, de az eredmények nagyon eltérőek egymástól.

8. Összefoglalás

A ponthibák tulajdonságainak meghatározása a kvantummechanika módszereivel igen bonyolult, a gyakorlatban nehézkesen használható eredményeket ad. Ezért a gyakorlatban a ponthibák tulajdonságainak leírására empirikus potenciálokat alkalmaznak. A dolgozatban ezekről a módszerekről adtunk rövid áttekintést. A számítógépek alkalmazása óta igen jól használhatók az összetett polinomiális potenciálok. Ezekkel a kísérleti adatokhoz jól illeszkedő eredményeket kaphatunk.

Az irodalmi eredmények sok esetben eltérőek egymástól. Ennek oka legtöbbször a számítógépes módszerek eltérő típusú alkalmazása. Az eredmények ugyanis erősen függenek attól, hogy a rács relaxációját a ponthiba körül mekkora térfogatban veszik figyelembe.

IRODALOM

1. J. E. Lennard—Jones, Proc. R. Soc. A., 106, 463, 1924.
2. I. M. Torrens: Interatomic Potentials, Academic Press, New York and London, 1972. p. 77.
3. P. M. Morse, Phys. Rev. 34, 57, 1929.
4. L. A. Girifalco and V. G. Weizer, Phys. Rev. 114, 687, 1959.
5. R. A. Buckingham, Proc. Roy. Soc. A, 168, 264, 1938.
6. A. Seeger and E. Mann, J. Phys. Chem. Solids, 12, 326, 1960.
7. J. B. Gibson and A. N. Goland, Milgram M. and Vineyard G. H. Phys. Rev. 120, 1229, 1960.
8. R. A. Johnson and E. Brown, Phys. Rev., 127, 446, 1962.
9. H. B. Huntington and F. Seitz, Phys., Rev. 61, 315, 1942.
10. M. Born and J. E. Mayer, Z. Phys., 75, 1, 1932.
11. H. B. Huntington, Phys. Rev. 91, 1092, 1953.
12. C. Erginsoy, G. H. Vineyard and A. Englert, Phys. Rev. A134, 595, 1964.
13. R. A. Johnson, Phys. Rev. A134, 1429, 1964.
14. A. Englert, H. Tompa and R. Bullough, Fundamental Aspects of Dislocation Theory, p. 273, NBS Special Publ. 1971. p. 317.
15. W. D. Wilson and R. A. Johnson, Phys. Rev. B1, 3510, 1970.

16. R. A. Johnson, *Phys. Rev. B6*, 2094, 1972.
17. M. I. Baskes and C. F. Melius, *Phys. Rev. B20*, 3197, 1979.
18. J. B. Gibson, A. N. Goland, M. Milgram and G. H. Vineyard, *Phys. Rev. 120*, 1229, 1960.
19. V. Spiric, L. E. Rehn, K-H. Robrock, and W. Schilling, *Phys. Rev. B15*, 672, 1977.
20. F. W. Young, *J. Nucl. Mater. 69—70*, 310, 1978.
21. J. S. Koehler, in *Vacancies and Interstitials in Metals*, edited by A. Seeger, D. Schumacher, W. Schilling and J. Diehl, North-Holland, Amsterdam, 1970. p. 169.
22. H. Kronmüller, in Ref. 21, p. 183.
23. K. P. Chik, in Ref. 21, p. 183.
24. A. Seeger and H. Mehrer, in Ref. 21, p. 1.
25. D. Edwards, Jr. and E. V. Kornalsen, *Surf. Sci. 44*, 1, 1974; C. L. Snead, Jr., A. N. Goland, and F. W. Wiffen, *J. Nucl. Mater. 64*, 195, 1977.
26. M. Doyama and J. S. Koehler, *Acta Met. 24*, 871, 1976.
27. Tóth L., *Magyar Fizikai Folyóirat*, 30, 417, 1982.

3. VAKANCIÁK ÉS VAKANCIAKOMPLEXEK KÉTALKOTÓS ÖTVÖZETEKBE

BÉRCES GYÖRGY és KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	333
2. A vakanciák körüli atomi elrendeződések geometriai jellemzése	335
3. Az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú vakanciák termikus egyensúlyi koncentrációjának meghatározása	337
4. A z_{ix} együtthatók és a lényegesen különböző konfigurációk számának meghatározása	339
5. A g_{ix} meghatározása kvázikémiai közelítésben	344
5.1 Komplexek képződési energiája	345
5.2 Komplexek képződési entrópiája	347
6. Diskusszió	348
6.1 Általánosított Lomer-összefüggés	348
6.2 A látszólagos képződési szabadentalpia	349
6.3 A másodszomszédok hatása	350
7. Összefoglalás	352
Irodalom	353

1. Bevezetés

A kristályos anyagban található különböző rácshibák (ponthibák, diszlokációk, szemcsehatárok stb.) a vizsgált anyag fizikai tulajdonságait lényegesen megváltoztathatják. A ponthibák tulajdonságainak ismerete különösen fontos pl. az elektromos vezetési és diffúziós folyamatok, a fémkinetikai jelenségek (kúszás, feszültségrelaxáció stb.), az ötvözetekben lejátszódó kiválások és rendeződéses folyamatok megértésében.

A ponthibák termodinamikailag stabil képződmények lehetnek. Ez azt jelenti, hogy adott T hőmérsékleten egy adott típusú hibából a T hőmérséklet által meghatározott számú hiba van jelen a kristályban. Jól ismert a

$$C_v(T) = \exp \left\{ -\frac{g_{1v}^F}{kT} \right\} \quad (1)$$

összefüggés, amely megadja a T abszolút hőmérsékleten, $p = \text{áll.}$ nyomáson levő tiszta fémbe keletkező vakanciák számát [1]. (g_{1v}^F az egyetlen vakancia képződéséhez szükséges szabadentalpia értéke, k a Boltzmann-állandó.) Hasonló jellegű kifejezés adható meg intersticiálisokra, valamint ponthibák összekapcsolódásával keletkező kis hibacsoportok (Frenkel-párok, divakanciák, trivakanciák stb.) egyensúlyi koncentrációjára [2, 3].

A ponthibákkal kapcsolatos elméleti és kísérleti vizsgálatok jelentős része az ötvözetekben levő vakanciák és szennyező atomok összekapcsolódásával keletkező kis hibahalmazok tulajdonságaival foglalkozik.

Híg, kétkomponensű, szubsztitúciós szilárd oldatokban a termikus egyensúlyban levő szabad (C_{1v}) és a szennyező atomokhoz kötött (C_{vs}) állapotban levő vakanciák együttes (C_v) száma [4]:

$$C_v = C_{1v} + C_{vs}, \quad (2)$$

ahol

$$C_{1v}(T) = (1 - ZC_s) \cdot \exp\left\{-\frac{g_{1v}^F}{kT}\right\} \quad (3)$$

és

$$C_{vs}(T) = ZC_s \cdot \exp\left\{-\frac{g_{vs}^F}{kT}\right\}. \quad (4)$$

C_s a szennyező atomok koncentrációja, Z a kristály koordinációs száma (tércentrált köbös (tck) rácsra $Z=8$, felületcentrált köbös (fck) rácsra $Z=12$), g_{1v}^F a monovakancia, g_{vs}^F a vakancia szennyező pár képződéséhez szükséges szabadentalpia értéke.

Az elsőként Lomer által megadott (2)–(4) kifejezések két lényeges megszorítás mellett érvényesek:

1. a szennyező atomok koncentrációja kicsiny ($C_s \ll 1$),

2. egy vakanciához egy szennyező atom kapcsolódik (1. ábra).

Dorn és Mitchell [5] megmutatta, hogy kétkomponensű (A és B atomokból álló), szubsztitúciós szilárd oldatokban megadható a szabad és kötött állapotban levő vakanciák száma abban az esetben is, ha:

1. a „szennyező” koncentráció tetszőleges ($0 \leq C_s = c_B \leq 1$),

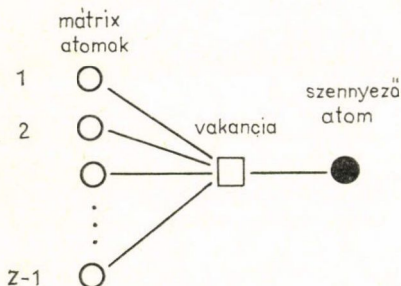
2. egy vakanciához több szennyező atom kapcsolódik.

Megjegyezzük, hogy mind a Lomer, mind a Dorn és Mitchell által alkalmazott tárgyalásmód még azt a feltevést is tartalmazza, hogy a vakanciák csoportosulásai elhanyagolhatók.

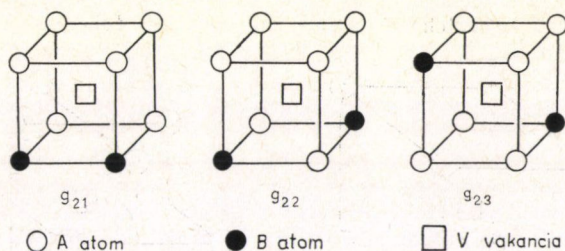
Jelölje c_i ($0 \leq i \leq Z$) azoknak a vakanciáknak a koncentrációját, amelyeknek i számú B (szennyező) atom a szomszédja. A következőkben ha egy vakanciának i számú B atom a szomszédja, akkor azt mondjuk, hogy a vakancia „ i -edik állapotban van”, az elrendezést pedig „ i -edik állapotú konfigurációnak” nevezzük. Egy i -edik állapotot az i darab B és $Z-i$ számú A atom több elrendezése is létrehozhat. Az állapotok számát, illetve egy állapotban belül a „lényegében különböző konfigurációkat” — ezek értelmezését a későbbiekben adjuk meg —, a kristály geometriája határozza meg. Mindenesetre várható, hogy az atomok lényegesen különböző geometriai elrendezéseihez más és más képződési szabadentalpia érték tartozik (2. ábra).

Dorn és Mitchell az i -edik állapotú konfigurációk mindegyikéhez egy konfigurációtól független g_i átlagos képződési szabadentalpia értéket rendelt és ennek felhasználásával c_i -re a

$$c_i(T) = \Theta_i \exp\left\{-\frac{g_i}{kT}\right\} \quad (5)$$



1. ábra. Vakancia-szennyező kapcsolódásának sematikus ábrázolása híg ötvözetekben



2. ábra. Két B atom és hat A atom lehetséges lényegében különböző konfigurációi a vakancia első szomszédjai által meghatározott helyeken, tck fémekben

összefüggés adódott, ahol

$$\Theta_i = \binom{Z}{i} c_A^{Z-i} c_B^i = \frac{Z!}{(Z-i)! i!} (1-c_B)^{Z-i} c_B^i. \quad (6)$$

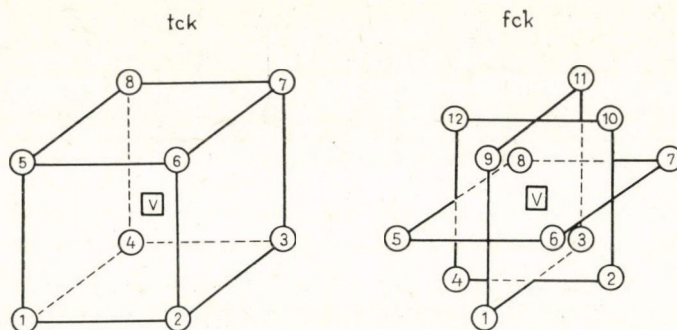
Itt most c_A és c_B a mátrix, illetve szennyező atomok koncentrációja. Híg ötvözetek esetén ($c_B \ll 1$) — ha csak a monovakanciák ($i=0$), illetve a vakancia szennyező párok ($i=1$) számára vagyunk kíváncsiak —, akkor az (5) és (6) kifejezésekből a (3), (4) alatti Lomer-összefüggések adódnak ($c_0 = C_{1v}$ és $c_1 = C_{vs}$).

A továbbiakban a lényegében különböző konfigurációkat energetikailag is megkülönböztetjük egymástól és megadjuk az (5) és (6) kifejezések egy általánosabb alakját.

2. A vakanciák körüli atomi elrendeződések geometriai jellemzése

A következőkben, néhány a csoportelméletben használatos terminológia és jelölés segítségével megadjuk egy adott rácspont körül az atomok lehetséges elhelyezésével kapcsolatos fogalmak pontos értelmezését.

Jelölje n_A és n_B egy kétkomponensű szubsztitúciós szilárd oldatban az A (mátrix) és B (ötvöző, szennyező) atomok számát. Állandó T hőmérsékleten és p nyomáson az ötvözetben keletkezett termikus egyensúlyi vakanciák száma legyen n_V . Ha a vakanciák csoportosulásait figyelmen kívül hagyjuk, akkor feltételezhető, hogy egy vakancia néhány rácscellányi sugarú környezetében további vakanciák nincsenek. A vakancia kölcsönhatásba lép az öt közrefogó A és B atomokkal, ez a kölcsönhatás azonban viszonylag rövid — néhány rácscellányi — hatótávolságú [6, 7]. Jelölje X ezeknek, a vakanciával még számottevő kölcsönhatást eredményező rácspontoknak a halmazát. Az X halmazt a vakancia „környezetének”, a halmaz $|X|$ számú elemét pedig a vakancia „szomszédjának” nevezzük. Első közelítésként feltehetjük, hogy a vakanciának és az öt közrefogó A és B atomoknak az energetikai jellemzése lehetséges az X környezeten belüli geometriai elrendezés ismeretében. A 3. ábrán tck és fck kristályszerkezetekre feltüntetjük a vakancia első szomszédjai által meghatározott X környezeteket, amelyek függetlenek a vakancia helyzetétől.



3. ábra. Az első szomszédok által meghatározott X környezet tck és fck fémekben

Az A és B atomok egy adott elhelyezése ebben az X környezetben jellemezhető az

$$f: X \mapsto \{A, B\} \quad (7)$$

függvénnyel, amely az $x_k \in X (1 \leq k \leq |X|)$ helyen megadja, hogy a k -adik pontba A vagy B típusú atomot helyeztünk. Az f függvényt a továbbiakban elhelyezés-függvénynek, vagy konfigurációfüggvénynek nevezzük. Az atomok két elhelyezését azonosnak, illetve különbözőnek tekintjük, ha az elhelyezéseket reprezentáló függvények azonosak, illetve különbözőek. Az i -edik állapotban $(0 \leq i \leq |X|)$ levő vakanciákat az

$$F^{(i)}: \{f^{(i)}: X \mapsto \{A, B\} \mid f^{(i)} \text{ pontosan } i\text{-szer veszi fel } B\text{-t}\} \quad (8)$$

i -típusú elhelyezésfüggvények halmazának elemei jellemzik. Az $F^{(i)}$ és az

$$F := \bigcup_{i=0}^{|X|} F^{(i)} \quad (9)$$

összes konfigurációfüggvény halmazának elemei számára elemi kombinatorikai megfontolásokból adódnak az

$$|F^{(i)}| = \binom{|X|}{i} \quad (10)$$

és

$$|F| = \sum_{i=0}^{|X|} |F^{(i)}| = 2^{|X|} \quad (11)$$

összefüggések.

Ha $\langle S(X), * \rangle$ jelöli az előzőekben definiált X halmaz permutációsoportját, ahol

$$S(X) := \{g: X \mapsto X \mid g \text{ bijekció}\}, \quad (12)$$

akkor megadható egy $M(X) \subset S(X)$, $\langle M(X), * \rangle$ részcsoport, amelynek elemei fizikai értelemben vett mozgatósi transzformációk. ($M(X) \neq \emptyset$, hiszen az $S(X)$ -beli identitást mindenképpen tartalmazza.) Nyilvánvaló, hogy ha $g \in M(X)$ és \circ -rel jelöljük a szokásos függvénykompozíciót, akkor bármely $f \circ g \in F$ konfigurációhoz

ugyanaz a képződési szabadentalpia érték tartozik, mint $f \in F$ -hez. Ennek alapján két konfiguráció, f_1 és f_2 lényegében (azaz itt a képződési szabadentalpia szempontjából) azonosnak tekinthető, ha található olyan $g \in M(X)$, amelyre teljesül az

$$f_1 = f_2 \circ g \quad (\text{jelölésben } f_1 \simeq f_2) \quad (13)$$

egyenlőség.

Ha a lényegében azonos tulajdonságot mint relációt tekintjük, akkor nem nehéz megmutatni, hogy ez egy ekvivalenciareláció és ezáltal az F halmaz elemeinek diszjunkt osztályfelbontását eredményezi:

$$F = \bigcup_{i=0}^{|X|} \bigcup_{\alpha} [\overline{f^{(i)}}]_{\alpha}, \quad [\overline{f^{(i)}}]_{\alpha} \cap [\overline{f^{(i)}}]_{\beta} = \emptyset \quad \text{ha } \alpha \neq \beta, \quad (14)$$

ahol $[\overline{f^{(i)}}]_{\alpha}$ jelöli az $f^{(i)}$ konfigurációval lényegében azonos konfigurációk halmazát, a görög indexekkel pedig az egyes osztályokhoz rendelünk egy-egy egész számot. A lényegében különböző elhelyezések tehát különböző osztályok elemei, ezért számuk a (14) felbontásban szereplő osztályok számával adható meg. Célszerűségi okokból az $[\overline{f^{(i)}}]_{\alpha}$ osztály elemeire, mint i állapotú α konfigurációjú elrendezésekre hivatkozunk ($\langle i, \alpha \rangle$ állapot). Lényeges lesz a továbbiak szempontjából az $[\overline{f^{(i)}}]_{\alpha}$ osztály $z_{i\alpha}$ elemeinek a száma

$$z_{i\alpha} := |[\overline{f^{(i)}}]_{\alpha}|, \quad (15)$$

amelynek segítségével az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotban levő vakanciák $c_{i\alpha}$ termikus egyensúlyi koncentrációjára egy, az (5) kifejezéshez hasonló összefüggés adható meg.

3. Az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú vakanciák termikus egyensúlyi koncentrációjának meghatározása

Tételezzük fel, hogy ismerjük az i -edik állapoton belüli α konfigurációkat. Ha az $\langle i, \alpha \rangle$ állapot létrehozása $g_{i\alpha}$ képződési szabadentalpiát igényel, és $n_{i\alpha}$ jelöli az ezen állapotban levő vakanciák számát, akkor a vakanciák keletkezése miatt a kristály $G = H - TS$ szabadentalpiájának növekedése:

$$\Delta G^F = \sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \cdot g_{i\alpha}. \quad (16)$$

A $g_{i\alpha}$ képződési szabadentalpia előállítható a

$$g_{i\alpha} = h_{i\alpha} - T \cdot s_{i\alpha} \quad (17)$$

alakban, ahol $h_{i\alpha}$ és $s_{i\alpha}$ jelöli a képződési entalpiát és entrópiát. A kristály teljes szabadentalpia megváltozásának számításakor figyelembe kell venni egy ΔS_c konfigurációs entrópia változást, amely a

$$\Delta S_c = k \cdot \ln(W/W_0) \quad (18)$$

alakban írható fel, ahol a W/W_0 értéke megadja, hogy a vakanciák képződésével mennyiben változott az adott makroállapotot megvalósító mikroállapotok száma a kezdeti állapothoz képest.

A W_0 értéke homogén szubsztitúciós ötvözetekre:

$$W_0 = \frac{(n_A + n_B)!}{n_A! \cdot n_B!}, \quad (19)$$

míg W értéke felírható három tényező szorzataként a

$$W = W_1 \cdot W_2 \cdot W_3 \quad (20)$$

alakban, ahol

$$W_1 = \frac{n!}{(n - n_V)! \prod_{i=0}^{|X|} \prod_{\alpha} (n_{i\alpha})!} \quad (21)$$

megadja az összes $n_{i\alpha}$ számú $\langle i, \alpha \rangle$ állapotban levő vakancia elhelyezéseinek a számát az $n = n_A + n_B + n_V$ számú rácsponton belül. Az $n_{i\alpha}$ számú X környezet mindegyikén belül $z_{i\alpha}$ módon lehet az A és B atomokat elhelyezni úgy, hogy $\langle i, \alpha \rangle$ állapotot hozzanak létre. Az összes $\langle i, \alpha \rangle$ állapoton belül tehát

$$W_2 = \prod_{i=0}^{|X|} \prod_{\alpha} (z_{i\alpha})^{n_{i\alpha}} \quad (22)$$

számú különböző elrendezése lehet az atomoknak.

Az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotokban, a vakanciák X környezetén belül levő B és A atomok száma:

$$n_B^x = \sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} i \cdot n_{i\alpha}, \quad (23)$$

valamint

$$n_A^x = \sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} (|X| - i) \cdot n_{i\alpha}, \quad (24)$$

ezért együttes számukra az

$$n_A^x + n_B^x = |X| \sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} = |X| \cdot n_V \quad (25)$$

adódik. A vakanciák környezetén kívüli $(n_A - n_A^x)$ A atom és $(n_B - n_B^x)$ B atom elhelyezése az $n - n_V \cdot (|X| + 1)$ helyre

$$W_3 = \binom{n_A + n_B - n_V \cdot |X|}{n_A - n_A^x} = \binom{n_A + n_B - n_V \cdot |X|}{n_B - n_B^x} \quad (26)$$

féle különböző módon történhet.

A kristály teljes szabadentalpiájának megváltozása a (18) alatti konfigurációs entrópia figyelembevételével a

$$\Delta G = \sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} n_{i\alpha} \cdot g_{i\alpha} - T \cdot \Delta S_c \quad (27)$$

alakban írható fel. Az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotokban levő vakanciák n_{ix} száma, állandó nyomáson és hőmérsékleten a

$$\frac{\partial(\Delta G)}{\partial n_{ix}} = 0, \quad 0 \leq i \leq |X| \quad \text{és} \quad \alpha = 1, 2, \dots \quad (28)$$

egyenletekből határozható meg.

A (21), (22), (26) összefüggések és a Stirling-formula felhasználásával az

$$n_{ix} = n \cdot z_{ix} \frac{(n_A - n_A^x)^{|X|-i} \cdot (n_B - n_B^x)^i}{(n_A - n_A^x + n_B - n_B^x)^{|X|}} \cdot \exp \left\{ -\frac{g_{ix}}{kT} \right\} \quad (29)$$

implicit egyenletrendszer nyerjük n_{ix} -kra. Bevezetve a $c_{ix} = n_{ix}/n$, valamint a $c_A = n_A/n$ és $c_B = n_B/n$ jelöléseket, továbbá felhasználva, hogy általában teljesül az $n_A^x \ll n_A$, $n_B^x \ll n_B$ feltétel, a (29) egyenletrendszer az alábbi egyszerűbb

$$c_{ix}(T) = z_{ix} \cdot c_A^{|X|-i} \cdot c_B^i \exp \left\{ -\frac{g_{ix}}{kT} \right\} = \Theta_{ix} \exp \left\{ -\frac{g_{ix}}{kT} \right\} \quad (30)$$

alakra hozható. Mivel

$$\sum_{\alpha} z_{ix} = |F^{(i)}| = \binom{|X|}{i}, \quad (31)$$

ezért a Θ_{ix} együtthatók között fennáll a

$$\sum_{i=0}^{|X|} \sum_{\alpha} \Theta_{ix} = \sum_{i=0}^{|X|} c_A^{|X|-i} c_B^i \sum_{\alpha} z_{ix} = (c_A + c_B)^{|X|} \cong 1 \quad (32)$$

összefüggés, felhasználva, hogy $c_v \ll c_A + c_B$.

(30) felhasználásával az i -edik állapotban levő vakanciák koncentrációja:

$$c_i = \sum_{\alpha} c_{ix} = c_A^{|X|-i} c_B^i \sum_{\alpha} z_{ix} \cdot \exp \left\{ -\frac{g_{ix}}{kT} \right\}. \quad (33)$$

ami megegyezik a Dorn és Mitchell által kapott (5) kifejezéssel abban a közelítésben, ha az X környezetet az első szomszédok alkotják a kristályban ($|X|=Z$), és az i -edik állapoton belül nincs energetikai különbség az egyes konfigurációk között ($g_{ix} = g_i$).

4. A z_{ix} együtthatók és a lényegesen különböző konfigurációk számának meghatározása

A 3. pontban meghatároztuk az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotban levő vakanciák c_{ix} termikus egyensúlyi koncentrációját egy kétkomponensű ötvözetben. Eredményül egy Boltzmann-típusú kifejezést kaptunk, amely szerint

$$c_{ix} \sim z_{ix}, \quad (34)$$

azaz az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú vakanciák koncentrációja egyenesen arányos az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotot megvalósító lényegében azonos elhelyezések számával.

Egy $\langle i, \alpha \rangle$ állapotot reprezentáló $\overline{f^{(i)}}$ osztályban levő elemek számának meghatározásában a permutációcsoport pályájának fogalma ad segítséget. Tekintsük a 2. pontban definiált $\langle M(X), * \rangle$ permutációs részcsoporthoz és legyen

$$\overline{M(X)} := \{ \bar{g} : F^{(i)} \mapsto F^{(i)} \mid \bar{g}(f^{(i)}) := f^{(i)} \circ g \text{ és } g \in M(X) \}. \quad (35)$$

Az $\overline{M(X)}$ halmaz $|M(X)|$ számú \bar{g} eleméről könnyű megmutatni, hogy bijekciók, és csoportot alkotnak a

$$\bar{g}_1 \square \bar{g}_2 := \overline{g_1 * g_2} \quad (36)$$

műveletre vonatkozólag. Ha $f_1^{(i)}$ és $f_2^{(i)}$ lényegében azonosak, ugyanazon $\overline{f^{(i)}}$ osztályhoz tartoznak, ami most azt jelenti, hogy van olyan $\bar{g} \in \overline{M(X)}$, amelyre fennáll az

$$f_1^{(i)} = \bar{g}(f_2^{(i)}) \quad (37)$$

egyenlőség. Ez csoportelméleti szempontból azt jelenti, hogy az $f_1^{(i)}$ és $f_2^{(i)}$ az $\overline{M(X)}$ permutációcsoport ugyanazon $O_{f_1^{(i)}} = O_{f_2^{(i)}}$ pályájához tartozik. Ezért $O_{f^{(i)}} = \overline{f^{(i)}}$, azaz

$$z_{i\alpha} = |O_{f^{(i)}}|. \quad (38)$$

Az $O_{f^{(i)}}$ pályán levő elemek száma pedig a csoportelméletből ismert

$$|O_{f^{(i)}}| = \frac{|\overline{M(X)}|}{|M_{f^{(i)}}|} = \frac{|M(X)|}{|\overline{M_{f^{(i)}}}|} \quad (39)$$

kifejezéssel adható meg, ahol $\overline{M_{f^{(i)}}}$ az $\overline{M(X)}$ azon részcsoporthoz, amelynek $\bar{g} \in \overline{M_{f^{(i)}}}$ elemeire fennáll, hogy $\bar{g}(f^{(i)}) = f^{(i)}$ [9, 10].

Az $\overline{f^{(i)}}$ osztályok számának meghatározásával a csoportelmélet Pólya-féle számítási módszere foglalkozik [8–10]. A témakör viszonylag széles terjedelme miatt itt csak a számunkra érdekes probléma igen elegáns végeredményének megadásával foglalkozhatunk, amely a Pólya-féle leszámplálási tétel (Pólya's Enumeration Theorem = PET) egy speciális esete.

Az $M(X)$ -beli g permutációkat felbontva diszjunkt ciklusok szorzatára, előállítható az $M(X)$ csoport $s = (s_1, s_2, \dots, s_{|X|})$ változóktól függő $Z[M(X), s]$ ciklusmutató polinomja:

$$Z[M(X), s] = |M(X)|^{-1} \sum_{g \in M(X)} \prod_{i=1}^{|X|} s_i^{\lambda_i(g)}, \quad (40)$$

ahol $\lambda_i(g)$ a g permutáció i hosszúságú ciklusainak számát jelöli. A PET szerint, ha elvégezzük a (40) polinomban az

$$s_i = a^i + b^i \quad (41)$$

helyettesítést, akkor a polinom kifejtésében szereplő $a^{|X| - i} b^i$ tag együtthatója megadja az $\overline{f^{(i)}}$ osztályok számát, azaz α maximális értékét.

A továbbiakban meghatározzuk az előzőekben leírt módszer segítségével a tck és az fck fémekben előforduló konfigurációkat abban a viszonylag egyszerű

esetben, amikor az X halmazt a vakancia első szomszédjai alkotják. Amint ez a 3. ábráról is látható, tek fémeknél ez a halmaz egy rácsvektorni élhosszúságú kocka csúcspontjaiból áll. Ennek a 8 elemű halmaznak az $M(X_{\text{tek}}) \subset S(X_{\text{tek}})$ mozgáscsoportja által meghatározott $Z[M(X_{\text{tek}}), s]$ ciklusmutató polinom [10]:

$$Z[M(X_{\text{tek}}), s] = \frac{1}{24} (s_1^8 + 8s_1^2s_3^2 + 9s_2^4 + 6s_4^2). \quad (42)$$

Elvégezve az $s_i = a^i + b^i$ helyettesítést, a

$$Z[M(X_{\text{tek}}), a + b] = a^8 + a^7b + 3a^6b^2 + 3a^5b^3 + 7a^4b^4 + 3a^3b^5 + 3a^2b^6 + ab^7 + b^8, \quad (43)$$

polinom $a^{8-i}b^i$ együtthatói megmutatják, hogy hány lényegében különböző konfiguráció van, amelyben a B atom i -szer szerepel. Az összes lényegében különböző elhelyezések száma:

$$1 + 1 + 3 + 3 + 7 + 3 + 3 + 1 + 1 = Z[M(X_{\text{tek}}), 2] = 23. \quad (44)$$

Ezen 23 elhelyezés mindegyike viszonylag rövid idő alatt „papírral és ceruzával” is megadható (4. ábra), különösen ha azt is figyelembe vesszük, hogy ha az i típusú lényegében különböző konfigurációkon az $A \leftrightarrow B$ cserét végrehajtjuk (konjugált konfigurációk), akkor megkapjuk a $8-i$ típusú lényegében különböző konfigurációkat. Ezt a tényt tükrözi a (43) alatt kifejtett ciklusmutató polinomban az $a^{8-i}b^i$ és a^ib^{8-i} tagok együtthatójának egyenlősége. A z_{ix} értékek a (39) összefüggés segítségével, vagy egyszerű kombinatorikai megfontolásból is megadhatók, hiszen az itt szereplő X_{tek} halmaz elemeinek száma nem túl nagy.

Fek fémeknél a vakancia közvetlen szomszédjai egy rácsvektorni élhosszúságú képzeletbeli kocka élfélező pontjaiban helyezkednek el (3. ábra). Az X_{fek} halmaz $M(X_{\text{fek}}) \subset S(X_{\text{fek}})$ mozgáscsoportja 24 darab 12 elemű permutációt tartalmaz és a $Z[M(X_{\text{fek}}), s]$ ciklusmutató polinomra [10]:

$$Z[M(X_{\text{fek}}), s] = \frac{1}{24} (s_1^{12} + 3s_2^6 + 9s_4^3 + 6s_1^2s_2^5 + 8s_3^4) \quad (45)$$

adódik. Az $s_i = a^i + b^i$ behelyettesítése után a

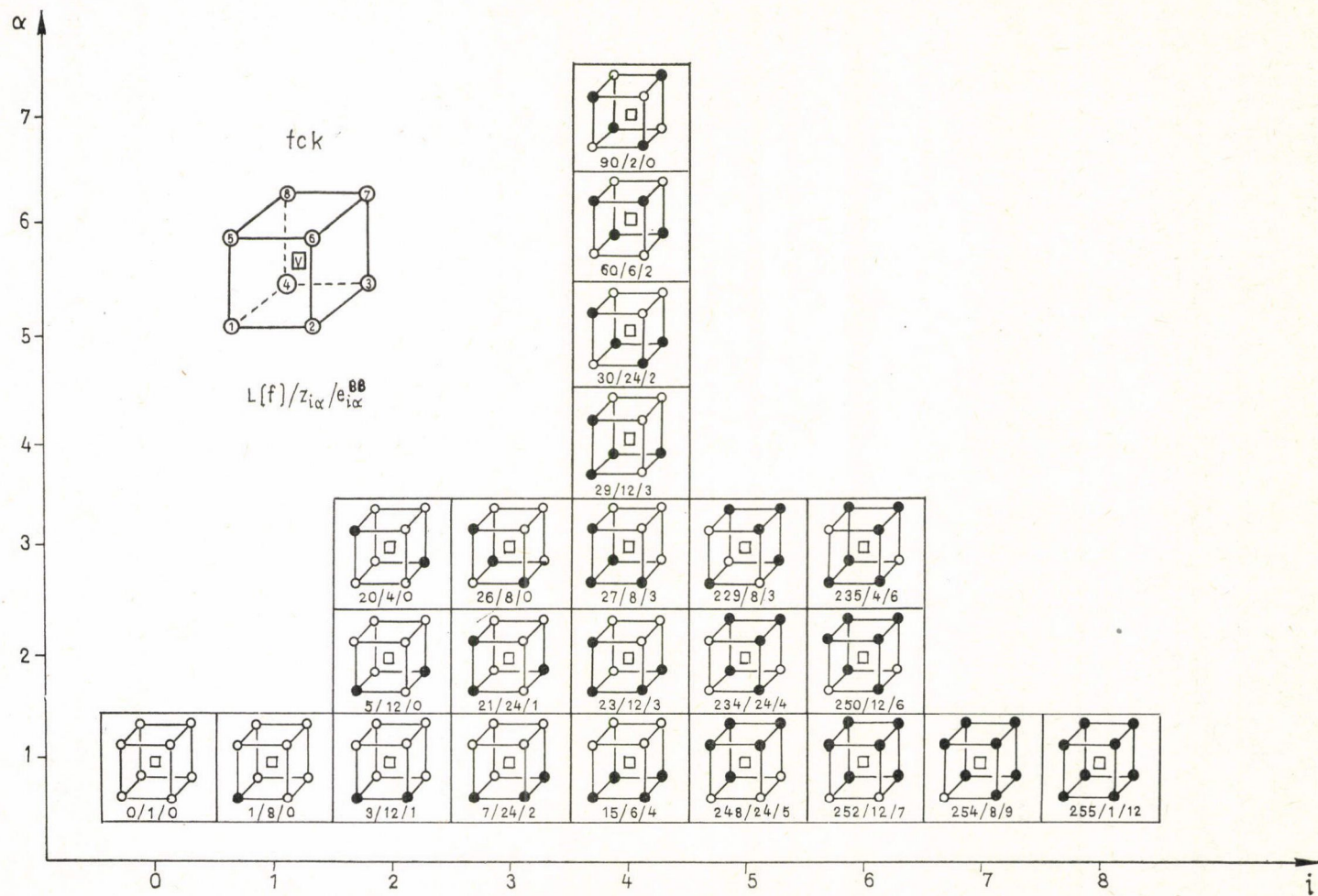
$$Z[M(X_{\text{fek}}), a + b] = a^{12} + a^{11}b + 5a^{10}a^2 + 13a^9b^3 + 27a^8b^4 + 38a^7b^5 + \\ + 48a^6b^6 + 38a^5b^7 + 27a^4b^8 + 13a^3b^9 + 5a^2b^{10} + ab^{11} + b^{12}, \quad (46)$$

polinom $a^{12-i}b^i$ tagjainak együtthatóiból leolvasható az i típusú konfigurációk száma. Mivel

$$Z[M(X_{\text{fek}}), 2] = 2 \cdot (1 + 1 + 5 + 13 + 27 + 38) + 48 = 218, \quad (47)$$

ezért ilyen nagyszámú ismeretlen konfiguráció keresésekor célszerű számítógépes eljárást alkalmazni. Legyen

$$l: \{A, B\} \rightarrow \{0, 1\} \quad \text{és} \quad l(A) = 0, \quad l(B) = 1. \quad (48)$$



4. ábra. $\langle i, \alpha \rangle$ konfigurációk tck fémekben

Mivel az

$$L: F \mapsto \{0, 1, 2, 3, \dots, 2^{|X|}-1\} \quad (49)$$

$$L(f) = \sum_{k=1}^{|X|} l[f(x_k)] \cdot 2^{k-1} \quad (49)$$

leképezés egy bijekció, ezért a $0, 1, 2, 3 \dots 2^{|X|}-1$ számok kettes számrendszerbeli felbontásához egyértelműen hozzárendelhető egy $f \in F$ konfiguráció, amelynél az

$$i = \sum_{k=1}^{|X|} l[f(x_k)] \quad (50)$$

érték megadja az f típusát, míg az $f^{(i)} \circ g \in F^{(i)}$, $(g \in M(X))$ előállításával összehasonlítást tehetünk a meglevő i típusú konfigurációk és $f^{(i)} \circ g$ között, ezáltal eldönthető, hogy $f^{(i)}$ új elrendezés-e. A program futási ideje lényegesen rövidíthető, mivel a ciklusmutató polinom által ismerjük a keresendő ismeretlen konfigurációk számát.

A z_{ix} értékek $f^{(i)}$ ismeretében meghatározhatók a (39) összefüggés segítségével, hiszen csak azokat a $g \in M(X)$ transzformációkat kell megkeresni, amelyek az $f^{(i)} \circ g = f^{(i)}$ azonosságot teljesítik.

Fek fémekre a számítás eredményeit az 5. ábra tartalmazza, amelyben — célszerűségi okokból — az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú f konfigurációk helyett az $L(f)$ és z_{ix} értékeket tüntettük fel.

5. A g_{ix} meghatározása kvázikémiai közelítésben

Ebben a pontban a kvázikémiai közelítést [11] alkalmazva meghatározzuk híg ötvözetek esetén az $\langle i, \alpha \rangle$ konfiguráció létrejöttéhez szükséges g_{ix} képződési szabadentalpia értékét. A kapott g_{ix} értékek ismeretében egy becslést adhatunk a c_{ix} termikus egyensúlyi koncentrációk nagyságára vonatkozólag.

Az $\langle i, \alpha \rangle$ komplexhez tartozó képződési szabadentalpia felírható a

$$g_{ix} = E_{ix} - pV_{ix} - TS_{ix} \quad (51)$$

alakban, ahol E_{ix} az $\langle i, \alpha \rangle$ konfiguráció létrejöttéhez szükséges képződési energia értéke, S_{ix} a hiba képződési entrópiája, amely elsősorban a vakanciák körüli A és B atomok rezgési frekvenciájának megváltozásából származik, V_{ix} pedig a hiba keletkezése során létrejövő rácsrelaxáció okozta térfogatváltozás.

Ha a térfogatváltozásból származó pV_{ix} entalpiajárulékot elhanyagoljuk, g_{ix} -ra a

$$g_{ix} = E_{ix} - TS_{ix} \quad (52)$$

kifejezést kapjuk. Ezt behelyettesítve a (30) összefüggésbe, a következő eredményt kapjuk:

$$c_{ix} = z_{ix} c_A^{|X|-i} c_B^i \exp \left\{ \frac{S_{ix}}{k} \right\} \cdot \exp \left\{ -\frac{E_{ix}}{kT} \right\}. \quad (53)$$

A továbbiakban E_{ix} és S_{ix} meghatározásával foglalkozunk.

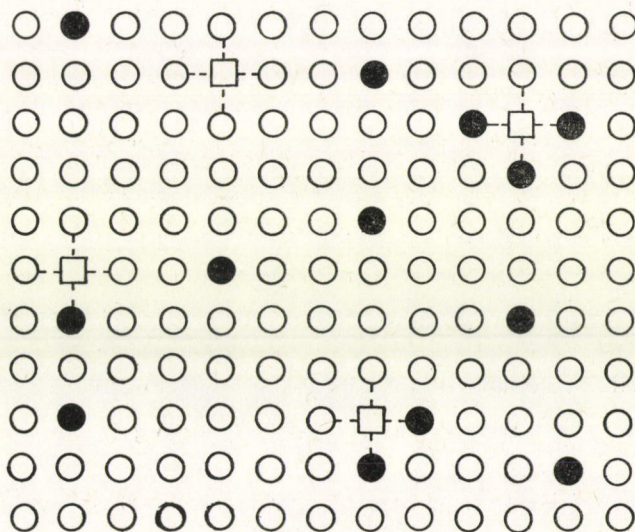
5.1. Komplexek képződési energiája

Tekintsük az A és B atomokból álló kristályt. Jelölje $E_{AA}^I, E_{BB}^I, E_{AB}^I$, valamint $E_{AA}^{II}, E_{BB}^{II}, E_{AB}^{II}$ az $A-A, B-B, A-B$ atompárok közötti kölcsönhatási energia nagyságát, ha a megfelelő atomok első, illetve második szomszédok. Doyama és Koehler [12] feltételezték, hogy a tiszta fémekben az A mátrixatomok és V vakanciák között fellép egy E_{AV} kölcsönhatási energia, amelyet „szellemkötésnek” („ghost bond”) neveztek el. Megmutatták, hogy a legtöbb fém esetében teljesül az

$$E_{AV} = \beta \cdot E_{AA} \cong 0,35 E_{AA} \quad (54)$$

összefüggés. A szerzők rámutattak arra, hogy elsősorban a tck szerkezetű fémeknél — ahol az első és második szomszédok távolságának aránya $\sim 1,15$, figyelembe kell venni a másodsomszéd kölcsönhatást is. Jelölje Z^I és Z^{II} egy tetszőleges atom első, illetve másodsomszédjainak számát. Fek fémekre $Z^I=12$, $Z^{II}=6$, tck fémekre pedig $Z^I=8$ és $Z^{II}=6$. A vakancia környezete álljon az első koordinációs héjon álló atomokból ($|X|=Z^I=Z$).

Ha az oldott B atomok koncentrációja nem túl nagy, akkor feltételezhető, hogy mind a B atomokat, mind pedig a vakancia-szennyező komplexeket többnyire A atomok veszik körül (6. ábra).



6. ábra. g_{ix} meghatározásához

Vizsgáljuk meg először, hogy a $\langle 0, 1 \rangle$ monovakancia állapot létrehozása mekkora energiát igényel! A vakancia keletkezése energetikailag felfogható úgy, hogy a vakancia helyén levő A atom kikerül a kristály szabad felületére (a kristály térfogata emiatt megnő) ezáltal Z^I számú $(A-A)^I$, valamint Z^{II} számú $(A-A)^{II}$ felszakított kötésnek átlagosan a fele köti a felszínen levő A atomot a kristályhoz.

A vakancia helyén, a korábban meglevő $(A-A)^I$ kötések¹ helyett $(A-V)^I$ kötések találhatók, így az E_{01} képződési energia értékére

$$E_{01} = (Z^I E_{AV}^I + Z^{II} E_{AV}^{II}) + \frac{1}{2} (Z^I E_{AA}^I + Z^{II} E_{AA}^{II}) - (Z^I E_{AA}^I + Z^{II} E_{AA}^{II}) \quad (55)$$

adódik, amely rendezés, majd a $\beta^I = E_{AV}^I/E_{AA}^I$ és $\beta^{II} = E_{AV}^{II}/E_{AA}^{II}$ paraméterek bevezetése után az

$$\begin{aligned} E_{01} &= \frac{Z^I}{2} (2E_{AV}^I - E_{AA}^I) + \frac{Z^{II}}{2} (2E_{AV}^{II} - E_{AA}^{II}) = \\ &= \frac{Z^I E_{AA}^I}{2} (2\beta^I - 1) + \frac{Z^{II} E_{AA}^{II}}{2} (2\beta^{II} - 1) \end{aligned} \quad (56)$$

alakra hozható.

Tekintsünk most egy tetszőleges $\langle i, \alpha \rangle$ konfigurációt, amelyet az $f^{(i)}$ elhelyezés-függvény reprezentál. Jelölje $\varphi_{iz}^{AA}(j)$, $\varphi_{iz}^{AB}(j)$, $\varphi_{iz}^{BB}(j)$ a j -edik pontba ($1 \leq j \leq Z$) befutó $(A-A)^{II}$, $(A-B)^{II}$, $(B-B)^{II}$ élek számát. A vakancia-szennyező komplex létrejöttét felfoghatjuk úgy, hogy létrehozunk egy monovakanciát tisztán A atom környezettel, majd az első szomszédokból a konfigurációnak megfelelően i számút kicserélünk a mátrixban levő A atomok által közrefogott B atomokkal.

A vakancia első szomszédai közül i számú A atom kicserélése B atomra a következő energiaváltozással jár:

$$\begin{aligned} i \cdot [(Z^I - 1)(E_{AB}^I - E_{AA}^I) + (E_{BV}^I - E_{AV}^I)] + \sum_{j=1}^{Z^I} [Z^{II} - \varphi_{iz}^{BB}(j)] \times \\ \times I[f(x_j)](E_{AB}^{II} - E_{AA}^{II}) + e_{iz}^{BB}(E_{BB}^{II} - E_{AA}^{II}), \end{aligned} \quad (57)$$

ahol e_{iz}^{BB} az $\langle i, \alpha \rangle$ konfigurációban levő másodsomszéd $(B-B)^{II}$ kötések számát jelenti, amely kifejezhető a φ_{iz}^{BB} függvény segítségével az

$$e_{iz}^{BB} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Z^I} \varphi_{iz}^{BB}(j) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{Z^I} \varphi_{iz}^{BB}(j) \cdot I[f(x_j)] \quad (58)$$

alakban.

A mátrixbeli B atomok A atomokra való kicserélésekor

$$i[Z^I(E_{AA}^I - E_{AB}^I) + Z^{II}(E_{AA}^{II} - E_{AB}^{II})] \quad (59)$$

nagyságú energia szabadul fel.

Az egyes energijárulékokat összeadva, valamint az (58) összefüggést felhasználva, E_{ix} -ra az

$$E_{ix} = E_{01} - i(E_{AB}^I - E_{AA}^I + E_{AV}^I - E_{BV}^I) - e_{iz}^{BB}(2E_{AB}^{II} - E_{AA}^{II} - E_{BB}^{II}) \quad (60)$$

összefüggés adódik. Ebből speciálisan vakancia szennyező párra ($i=1$ és $\alpha=1$):

$$E_{11} = E_{01} - (E_{AB}^I - E_{AA}^I + E_{AV}^I - E_{BV}^I), \quad (61)$$

amelyből a pár E_B kötési energiája:

$$E_B = E_{01} - E_{11} = E_{AB}^I - E_{AA}^I + E_{AV}^I - E_{BV}^I. \quad (62)$$

Eredményünk megegyezik a Doyama és Koehler által kapottal [12], amely a Seeger által [13] levezetett

$$E_B = \frac{1}{Z} (E_{coh}^A - E_{coh}^B - E_s) \quad (63)$$

összefüggésnek a „szellemkötés” figyelembevételével módosított változata (E_{coh}^A és E_{coh}^B az A , illetve B anyag kohéziós energiája, E_s a B anyag oldódáshője).

A másodsomszédoktól származó energiajárulék az adott konfigurációban levő $(B-B)^{II}$ kötések számától, valamint a

$$\Delta^{II} = 2 \left(E_{AB}^{II} - \frac{E_{AA}^{II} + E_{BB}^{II}}{2} \right) \quad (64)$$

másodsomszédoktól származó „rendeződési energia” értékétől függ. A fentiek alapján egy tetszőleges komplex képződési energiája tömörebb felírásban:

$$E_{ix} = E_{01} - iE_B - e_{ix}^{BB} \Delta^{II}. \quad (65)$$

5.2. Komplexek képződési entrópiája

Ponthibák keletkezésekor a hiba körül megváltozik az atomok v_{AA} rezgési frekvenciája. Ez a frekvenciaváltozás entrópiaváltozást eredményez, amelynek nagysága $h\nu \ll kT$ esetén a fajhő Einstein-féle elmélete [14] alapján:

$$3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu_{AA}} \right) \right] - 3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu'} \right) \right] = 3k \ln \left(\frac{\nu'}{\nu_{AA}} \right), \quad (66)$$

ahol ν' az atomok rezgési frekvenciája a hiba kialakulása után, h a Planck-állandó.

Tekintsünk ismét egy $\langle 0, 1 \rangle$ monovakancia állapotot. Jelölje ν_{AV} és ν_{BV} a vakancia környezetében levő A , illetve B atomok rezgési frekvenciáját. Ha ebből a környezetből i számú A atomot kiemelünk, majd a mátrixban levő A szomszédoktól körülvevő B atomokkal (ezek rezgési frekvenciája ν_{AB}) kicseréljük őket, akkor a rezgési entrópia megváltozása:

$$\begin{aligned} & -i \cdot 3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu_{AV}} \right) \right] - i \cdot 3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu_{AB}} \right) \right] + \\ & + i \cdot 3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu_{BV}} \right) \right] + i \cdot 3k \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu_{AA}} \right) \right] = \\ & = i \cdot 3k \cdot \ln \left(\frac{\nu_{AB}}{\nu_{AA}} \right) \cdot \left(\frac{\nu_{AV}}{\nu_{BV}} \right). \end{aligned} \quad (67)$$

Ezt felhasználva az $\langle i, \alpha \rangle$ komplex S_{ix} képződési entrópiájára

$$S_{ix} = S_{01} - i \cdot 3k \ln \left(\frac{\nu_{AA}}{\nu_{AB}} \right) \cdot \left(\frac{\nu_{BV}}{\nu_{AV}} \right) = S_{01} - i \cdot S_B \quad (68)$$

adódik, ahol S_B vakanciaszenyező kötési entrópia.

6. Diskusszió

6.1. Általánosított Lomer-összefüggés

Az előző pont eredményei alapján, kvázikémiai közelítésben nem túl nagy koncentrációjú ötvözetekre (amikor a mátrixbeli B atomoknak csak A atom első szomszédja van), az $\langle i, \alpha \rangle$ komplex képződési szabadentalpiája:

$$g_{iz} = g_{01} - i(E_B - TS_B) - e_{iz}^{BB} A^{\text{II}}. \quad (69)$$

Vizsgáljuk meg először azt az esetet, amikor a másodsomszéd kölcsönhatást nem vesszük figyelembe. Ekkor

$$g_{iz} = g_{01} - i(E_B - TS_B) = g_{01} - iG_B, \quad (70)$$

ami azt jelenti, hogy az azonos szennyező atomot tartalmazó konfigurációk energetikailag egyenértékűek. Ennek felhasználásával az i -edik állapotban levő vakanciák koncentrációjára

$$c_i = \sum_{\alpha} c_{i\alpha} = \exp \left\{ -\frac{g_{01}}{kT} \right\} \cdot \binom{z}{i} c_A^{z-i} c_B^i \exp \left\{ \frac{iG_B}{kT} \right\} \quad (71)$$

adódik, míg a teljes c_v vakanciakonzentráció a

$$c_v = \sum_{i=0}^z c_i = \exp \left\{ -\frac{g_{01}}{kT} \right\} \sum_{i=0}^z \binom{z}{i} c_A^{z-i} \cdot \left(c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \right)^i \quad (72)$$

összefüggéssel adható meg. A binomiális tétel felhasználásával adódik, hogy

$$c_v = \exp \left\{ -\frac{g_{01}}{kT} \right\} \cdot \left(c_A + c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \right)^z, \quad (73)$$

míg a

$$\frac{c_v}{\exp \left\{ -\frac{g_{01}}{kT} \right\}} = \frac{c_v}{c_v^{(A)}} = \left(c_A + c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \right)^z \quad (74)$$

hányados a tiszta A anyagban fellépő $c_v^{(A)}$ -hoz viszonyítva adja meg a vakancia-koncentráció értékét.

A (73) kifejezés a Lomer-összefüggés általánosítása komplexekre. Ha $c_B \left(\exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} - 1 \right) \ll 1$, akkor a $c_A = 1 - c_B$ felhasználásával:

$$\frac{c_v}{c_v^{(A)}} = \left[1 + c_B \left(\exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} - 1 \right) \right]^z \simeq 1 - z c_B + z c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\}, \quad (75)$$

ami megegyezik a (2)–(4) Lomer-formulákból nyerhető összefüggéssel.

A vakanciák környezetében levő B atomok koncentrációjára:

$$c_B^x = \sum_{i=0}^z i c_i = c_v^{(A)} \sum_{i=0}^z i \binom{z}{i} c_A^{z-i} \left(c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \right)^i. \quad (76)$$

Felhasználva a

$$\sum_{i=0}^n i \binom{n}{i} a^{n-i} b^i = nb(a+b)^{n-1} \quad (77)$$

azonosságot, c_B^x -re a

$$c_B^x = Z c_v^{(A)} c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \cdot \left(c_A + c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \right)^{Z-1} \quad (78)$$

kifejezést kapjuk, ami a c_v teljes vakanciakonzentrációira vonatkozó (73) összefüggés felhasználásával a

$$c_B^x = Z c_v c_B \frac{\exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\}}{c_A + c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\}} \quad (79)$$

alakban is felírható.

A $c_B^x < c_B$ egyenlőtlenségnek mindenkor teljesülnie kell, aminek felhasználásával egy becslést adhatunk a lehetséges G_B kötési energiák felső határára. Híg ötvözet ($c_B \ll 1$) esetén a T_m olvadáspont közelében, G_B -re a

$$G_B < -kT_m \ln \{Z c_v(T_m)\} \quad (80)$$

feltétel adódik. Pl. ha $T_m \simeq 10^3$ K, $c_v(T_m) \simeq 10^{-3}$, és $Z=12$, akkor $G_B < 0,38$ eV.

6.2. A látszólagos képződési szabadentalpia

A kristályban levő $n_v = \sum_{i=0}^Z n_i$ számú vakancia létrehozásához $\sum_{i=0}^Z n_i g_i$ szabadentalpia változás szükséges. Így az egyetlen vakanciára eső $\langle g^F \rangle$ átlagos képződési szabadentalpia (vagy látszólagos képződési szabadentalpia) értéke:

$$\langle g^F \rangle = \frac{\sum_{i=0}^Z n_i g_i}{\sum_{i=0}^Z n_i} = \frac{\sum_{i=0}^Z c_i g_i}{\sum_{i=0}^Z c_i} \quad (81)$$

Miután első szomszéd közelítésben

$$g_i = g_{01} - iG_B, \quad \text{a fenti összefüggés a}$$

$$\langle g^F \rangle = \frac{\sum_{i=0}^Z c_i (g_{01} - iG_B)}{c_v} = g_{01} - G_B \frac{\sum_{i=0}^Z i c_i}{c_v} = g_{01} - G_B \frac{c_B^x}{c_v} \quad (82)$$

alakra hozható. (79) felhasználásával:

$$g_{01} - \langle g^F \rangle = G_B \frac{c_B^x}{c_v} = \frac{Z G_B c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\}}{c_A + c_B \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\}} \quad (83)$$

Eredményünk megegyezik a *Schapink* által kvázikémiai közelítésben, az előzőekben alkalmazott úttól némileg eltérő módon kapottal [15]. A (83) összefüggés az alapja a *Lomer*, majd *Duckwort* és *Burke* által kifejlesztett analízisnek, amelynek segítségével g_{01} és $\langle g^F \rangle$ ismeretében meghatározható híg ötvözetekben a vakanciaszenyvező pár kötési energiája [16].

6.3. A másodszomszédok hatása

Az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú vakanciák termikus egyensúlyi koncentrációjára másodszomszéd közelítésben ($\Delta^{\text{II}} \neq 0$) (65) felhasználásával:

$$c_{i\alpha} = z_{i\alpha} c_v^{(A)} c_A^{Z-i} c_B^i \exp \left\{ \frac{iG_B}{kT} \right\} \exp \left\{ \frac{e_{i\alpha}^{BB} \Delta^{\text{II}}}{kT} \right\}. \quad (84)$$

Képezve a

$$\frac{c_{i\alpha}(\Delta^{\text{II}} \neq 0)}{c_{i\alpha}(\Delta^{\text{II}} = 0)} = \exp \left\{ \frac{e_{i\alpha}^{BB} \Delta^{\text{II}}}{kT} \right\} \quad (85)$$

hányadost, látható, hogy a másodszomszéd kölcsönhatás a nagyobb $e_{i\alpha}^{BB}$ értékek esetén lehet jelentős. Miután

$$\varphi_{i\alpha}^{AB}(j) + \varphi_{i\alpha}^{AA}(j) = L \quad (86)$$

és

$$\varphi_{i\alpha}^{AB}(j) + \varphi_{i\alpha}^{BB}(j) = L, \quad (87)$$

ahol L értéke tck fémekre 3, fck fémekre 4, adódik, hogy

$$\sum_{j=1}^Z I[f(x_j)] \cdot [\varphi_{i\alpha}^{AB}(j) + \varphi_{i\alpha}^{BB}(j)] = e_{i\alpha}^{AB} + 2e_{i\alpha}^{BB} = iL. \quad (88)$$

Így egy adott konfigurációhoz tartozó $e_{i\alpha}^{BB}$ értéke megadható a másodszomszéd A, B atomok közötti kötések ($e_{i\alpha}^{AB}$) számával:

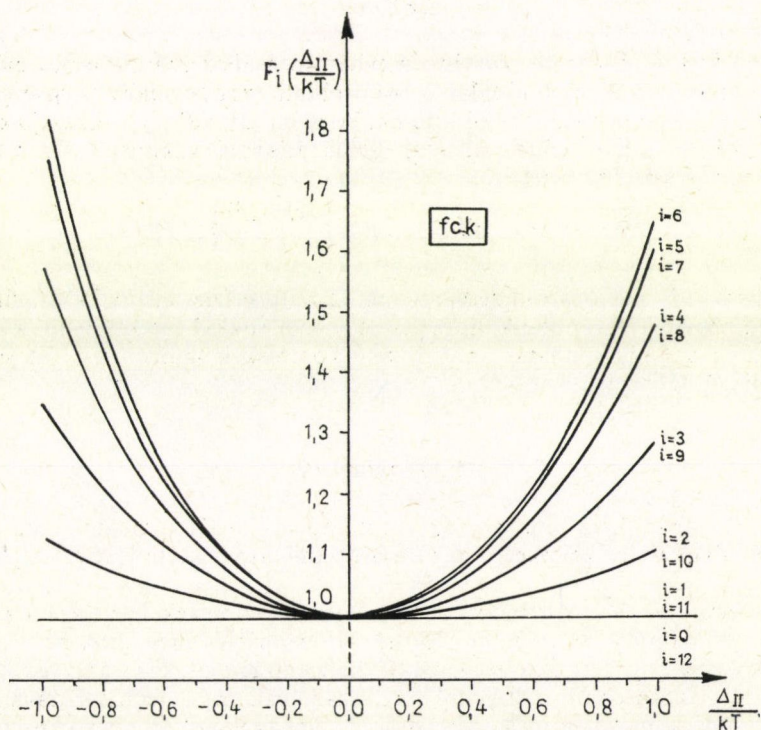
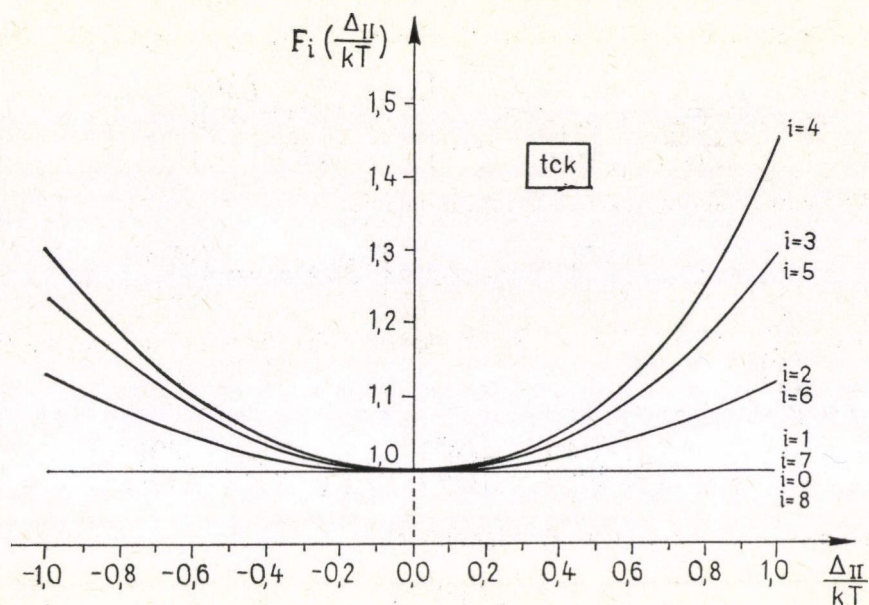
$$e_{i\alpha}^{BB} = \frac{iL - e_{i\alpha}^{AB}}{2}. \quad (89)$$

Az egyes konfigurációkhoz tartozó $e_{i\alpha}^{AB}$ értékeket tck és fck fémekre a 4. ábrán és az 1. táblázatban foglaltuk össze.

1. TÁBLÁZAT
 $\langle e_i^{BB} \rangle$ értékei tck és fck szerkezetekre

tck (i)	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$\langle e_i^{BB} \rangle$	0	0	0,429	1,29	2,57	4,29	6,43	9	12

fck (i)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\langle e_i^{BB} \rangle$	0	0	0,364	1,09	2,18	3,64	5,45	7,64	10,2	13,1	16,4	20	24



7. ábra. Az $F_i(\Delta_{II}/kT)$ függvénysereg, tck, illetve fck szerkezetekre

Konjugált konfigurációkra (lásd: 4. pontot) $z_{ix} = z_{Z-i, \alpha}$ és $e_{ix}^{AB} = e_{Z-i, \alpha}^{AB}$, ezért

$$\frac{c_{ix}}{c_{Z-i, \alpha}} = \left(\frac{c_A}{c_B}\right)^{Z-2i} \cdot \exp \left\{ \frac{(Z-2i) \left(G_B + \frac{L\Delta^{II}}{2}\right)}{kT} \right\}. \quad (90)$$

Az i -edik állapotú vakanciák koncentrációja:

$$c_i = \sum_{\alpha} c_{ix} = \binom{Z}{i} c_v^{(A)} c_A^{Z-i} c_B^i \exp \left\{ \frac{G_B}{kT} \right\} \sum_{\alpha} p_{ix} \exp \left\{ \frac{e_{ix}^{BB} \Delta^{II}}{kT} \right\}, \quad (91)$$

ahol $p_{ix} = \frac{z_{ix}}{\binom{Z}{i}}$. Mivel $\sum_{\alpha} p_{ix} = 1$ és az exponenciális függvény konvex függvény, így a

$$\sum_{\alpha} p_{ix} \exp \left\{ \frac{e_{ix}^{BB} \Delta^{II}}{kT} \right\} = F_i \left(\frac{\Delta^{II}}{kT} \right) \cdot \exp \left\{ \left(\sum_{\alpha} p_{ix} e_{ix}^{BB} \right) \cdot \left(\frac{\Delta^{II}}{kT} \right) \right\} \quad (92)$$

egyenlőség alapján bevezetett F_i függvényre

$$F_i \left(\frac{\Delta^{II}}{kT} \right) \cong 1 \quad (93)$$

teljesül.

Az $F_i(\Delta^{II}/kT)$ függvény közelítő meghatározásához számítógépes módszerrel összehasonlítottuk (92) bal oldalát a jobb oldali exponenciális függvénnyel. Az eredmény a 7. ábrán látható. Ebből kitűnik, hogy ha $\Delta^{II}/kT \leq 1$, akkor jó közelítéssel $F_i(\Delta^{II}/kT) \cong 1$. Ezt felhasználva az i -edik állapotú vakanciák koncentrációja másodsomszéd közelítésben:

$$c_i = c_i(\Delta^{II} = 0) \cdot \exp \left\{ \frac{\langle e_i^{BB} \rangle \Delta^{II}}{kT} \right\}, \quad (94)$$

ahol $\langle e_i^{BB} \rangle$ a BB másodsomszéd kötések várható értéke az i -edik konfiguráción belül. Eredményünk azt mutatja, hogy ha Δ^{II} nem sokkal kisebb, mint kT , akkor a másodsomszéd kölcsönhatás az i típusú komplexek koncentrációját jelentősen befolyásolja (1. táblázat).

7. Összefoglalás

A dolgozatban kétkomponensű, szubsztitúciós szilárd oldatokban, termikus egyensúlyi állapotban keletkező vakancia-ötvöző atom komplexek tulajdonságait vizsgáltuk.

Értelmeztük az i ötvöző atomot tartalmazó komplexek lényegében azonos és lényegében különböző α konfigurációinak a fogalmát és megadtuk az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú komplexek c_{ix} termikus egyensúlyi koncentrációját. c_{ix} arányos az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotot megvalósító mikroállapotok z_{ix} számával. z_{ix} meghatározására alkalmaztuk a csoportelmélet Burnside tételét, míg a lényegében különböző konfigurációk számát a Pólya-féle leszámplálási tétel segítségével adtuk meg.

Kiszámítottuk a lényegében különböző konfigurációk számát tck és fck fémekre, majd számítógép felhasználásával megkerestük ezeket az elrendezéseket, valamint a hozzájuk tartozó z_{ix} értékeket.

Kvázikémiai közelítésben (nem túl nagy koncentrációjú ötvözetekre) másodszomszéd kölcsönhatás figyelembevételével összefüggést adtunk meg az $\langle i, \alpha \rangle$ komplexek g_{ix} képződési szabadentalpiájára. Tck és fck szerkezetekre megadtuk a g_{ix} meghatározásához szükséges e_{ix}^{BB} (az adott konfigurációban szereplő másodszomszéd $B-B$ kötések száma) értékeket.

Megmutattuk, hogy ha a másodszomszéd kölcsönhatástól eltekintünk ($g_{ix} = \text{áll.}$ $i = \text{áll.}$, $\alpha = 1, 2, \dots$ esetén), akkor zárt összefüggéssel adható meg az ötvözetben levő összes vakanciák, valamint a vakanciákhoz kötött szennyező atomok koncentrációja. Meghatározható továbbá az egyetlen vakancia képződéséhez szükséges $\langle g^F \rangle$ látszólagos képződési szabadentalpia, amelyre befagyasztási kísérletekből lehet következtetni.

A másodszomszéd kölcsönhatás figyelembevétele módosítja az $\langle i, \alpha \rangle$ állapotú komplexek számát. Ez a korrekciós tényező magas hőmérsékleteken $\left(\frac{D_{11}}{kT} < 1 \right)$ jól közelíthető Boltzmann-típusú kifejezéssel, amelynek kitevőjében szereplő $\langle e_i^{BB} \rangle$ (az i -edik állapotú konfigurációkban szereplő $B-B$ másodszomszéd kötések várható értéke) értékeket megadtuk tck és fck szerkezetekre.

IRODALOM

1. C. Kittel: Introduction to Solid State Physics, John Wiley and Sons, Inc. New York, 1953.
2. A. J. Dekker: Solid State Physics, Prentice-Hall, Inc. 1957, p. 62.
3. A. C. Damask and G. J. Dienes: Point Defects in Metals, Gordon and Breach, New York, 1963.
4. W. M. Lomer, in Vacancies and Other Point Defects in Metals and Alloys, Institute of Metals Monograph and Report Series, London, 1958, p. 79.
5. J. E. Dorn and J. B. Mitchell, Acta Met. 14, 70, 1966.
6. R. R. Hasiguti, in Lattice Defects and Their Interactions, ed. R. R. Hasiguti, Gordon and Breach, New York, 1967, p. 203.
7. N. H. March, J. Nucl. Mat. 69—70, 490, 1978.
8. G. Pólya, Kombinatorische Anzahlbestimmungen für Gruppen, Graphen und Chemische Verbindungen, Acta Math. 68, 145, 1937.
9. I. Tomescu: Kombinatorika és alkalmazásai, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1978. p. 114.
10. F. Harary and E. M. Palmer: Graphical Enumeration, Academic Press, New York and London, 1973, p. 32.
11. A. A. Szmirnov: Teoria szplavov vnedreniya, Nauka, Moszkva, 1979.
12. M. Doyama and J. S. Koehler, Acta Met. 24, 871, 1976.
13. A. Seeger, in Lattice Defects and Their Interactions, ed. R. R. Hasiguti, Gordon and Breach, New York, 1967, p. 182.
14. H. B. Huntington, G. A. Shirn and E. S. Wajda, Phys. Rev. 99, 1085, 1955.
15. F. W. Schapink, Acta Met. 14, 1130, 1966.
16. F. C. Duckworth and J. Burke, Phil. Mag. 14, 473, 1966.

4. VAKANCIÁK KONDENZÁCIÓJA

ILLY JUDIT

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	355
2. Többszörös vakanciák keltése	356
2.1 Befagyasztás	356
2.2 Besugárzás	356
3. Többszörös vakanciák eltüntetése	356
4. A vakancia kondenzáció fajtái	357
4.1 Diszlokáció hurkok	357
4.1.1 Frank-féle rögzült hurkok	357
4.1.2 Prizmatikus hurkok	358
4.1.3 Prizmatikus hurkok keletkezése Frank-féle rögzült hurkokból	358
4.1.4 Duplán hibás hurkok	362
4.1.5 Kettős prizmatikus hurkok	364
4.2 Rétegződési hiba tetraéderek	364
5. Vakanciák eltűnése diszlokáció hurkokon, rétegződési hiba tetraédereken	366
5.1 Elnyelési hatékonyság	366
5.2 Az elnyelési hatékonyság meghatározása	367
6. Összefoglalás	369
Irodalom	370

1. Bevezetés

A vakanciák, a többi kristályhibához hasonlóan, növelik a kristály belső energiáját. Jelenlétük azonban nagy mértékben növeli a kristály konfigurációs entrópiáját is, így a termodinamikai egyensúly minden hőmérsékleten bizonyos számú vakancia jelenlétével valósul meg. Adott T hőmérsékleten a kristályban levő egyensúlyi vakanciakonzentrációt a következő kifejezés adja meg [1]:

$$c = c_0 e^{-g_F/kT}, \quad (1)$$

ahol g_F a vakancia képződési szabadentalpiája, k pedig a Boltzmann-állandó. Látható, hogy az egyensúlyi vakancia koncentráció a hőmérséklettel gyorsan változik.

Egy adott hőmérsékleten az egyensúlyinál lényegesen nagyobb vakancia koncentrációt is létre lehet hozni, pl. befagyasztással vagy besugárzással. A többszörös vakanciák jelenlétében azonban az anyag termodinamikailag nincs egyensúlyban, így olyan folyamatok indulnak meg, amelyek során a vakanciák mennyisége lecsökken az adott hőmérsékletre jellemző egyensúlyi értékre.

A következőkben ezekről a folyamatokról adunk áttekintést.

2. Többlétvakanciák keltése

2.1. Befagyasztás

Magas hőmérsékletről hirtelen lehűtve az anyagot, az alacsonyabb hőmérsékleten a kezdeti, magasabb hőmérsékletre tartozó nagy vakancia koncentráció bizonyos ideig megmarad, más szóval a magas hőmérsékletre jellemző vakancia koncentráció alacsonyabb hőmérsékleten befagyasztható [2]. A befagyasztott vakanciák száma erősen függ a hőmérsékletek megválasztásától, illetve az edzési folyamat sebességétől is. Nagy hűtési sebességgel több vakancia fagyasztható be, kis sebesség esetén ugyanis a vakanciák egy része már a hűtési folyamat közben a felületre, illetve más nyelőkhöz diffundálva eltűnhet.

2.2. Besugárzás

Besugárzással a hőmérséklet változtatása nélkül növelhető a vakanciák száma az anyagban [3, 4]. A folyamat során nagy energiájú részecskékkel bombázzák a kristályt. A bombázó részecskék ütköznek a kristály atomjaival, kiütik őket a helyükről, így ponthibákat keltenek. Általában bonyolult, soklépcsős reakció játszódik le, melynek eredményeképpen nagyszámú ponthiba keletkezik.

3. Többlétvakanciák eltűnése

A többlétvakanciák eltűnése háromféle módon történhet.

1. Diffúzió útján kijutnak a felületre.
1. A már meglevő diszlokációkhoz diffundálnak, és ott elnyelődnek. Ezt a folyamatot elősegíti az, hogy a diszlokációk feszültségtere a vakanciákra vonzó hatást gyakorol [1]. A diszlokációk vonzásának hatótávolsága azonban kicsi, $\sim 100 \text{ \AA}$.
3. A felületről, illetve a diszlokációktól távol eső térfogatokban a vakanciák kondenzálódnak. Ez a folyamat több lépcsőben megy végbe. A mozgó vakanciák egymással találkozva először vakanciapárokat, kisebb vakancia csoportosulásokat (clustereket) alkotnak. Az így kialakult üregek belső szabad felülettel rendelkeznek, ami a rendszer számára felületi energia növekedést jelent. Ezért az üregek 5–10 atomtávolság átmérőnél nagyobbra nem nőnek, hanem eddig még nem teljesen tisztázott mechanizmussal valamely szoros illeszkedésű sík mentén összelapulnak. Ennek eredményeként kisméretű diszlokáció hurok alakul ki, amely gyakran rétegződési hibát tartalmaz. Az így létrejövő diszlokáció hurkok energiája a rétegződési hiba energiájával együtt is kisebb, mint az üreg belső szabad felületének energiája volt. A diszlokáció hurkok a környezetükből a túltelítettség mértékétől függően további vakanciákat képesek felvenni és ezáltal növekedhetnek. A vakancia kondenzáció jelensége az ötvözetekben végbemenő kiválásos folyamatokhoz hasonló. A vakancia kondenzátumok létrejöhetnek a fent leírt módon homogén nukleációval, illetve az anyagban levő szennyeződéseken heterogén nukleációs mechanizmussal [5].

A következők pontban áttekintjük a vakancia kondenzáció különböző fajtáit.

4. A vakancia kondenzáció fajtái

A rétegződési hiba energia nagyságától függően lényegében kétféle kondenzáció alakulhat ki. A nagy rétegződési hiba energiájú fémekben (pl. Al, Ni) diszlokáció hurkok, a kis rétegződési hiba energiájú fémekben pedig (pl. Au, Ag) rétegződési hiba tetraéderek keletkeznek.

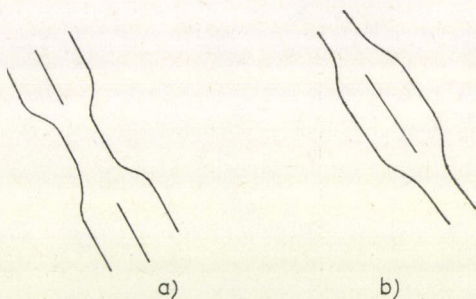
Mind a hurkok, mind a rétegződési hiba tetraéderek elektronmikroszkópban megfigyelhetők [6]. Az egyes vakancia kondenzátumok tulajdonságai (pl. méret, alak, orientáció, előfordulás) tehát elektronmikroszkópos vizsgálatok alapján meghatározhatók.

4.1. Diszlokáció hurkok

A diszlokációhurkok kétféle szempont szerint csoportosíthatók:

- a) körülzárnak-e rétegződési hibát, vagy sem, eszerint lehetnek Frank-féle rögzült, illetve prizmatikus típusúak [1, 6];
- b) egy rácssík helyén, illetve két rácssík között helyezkednek-e el, eszerint lehetnek vakancia, vagy intersticiális típusúak (1. ábra) [1].

A diszlokáció hurkok vizsgálatára modellanyagként legtöbbször az alumíniumot használják.



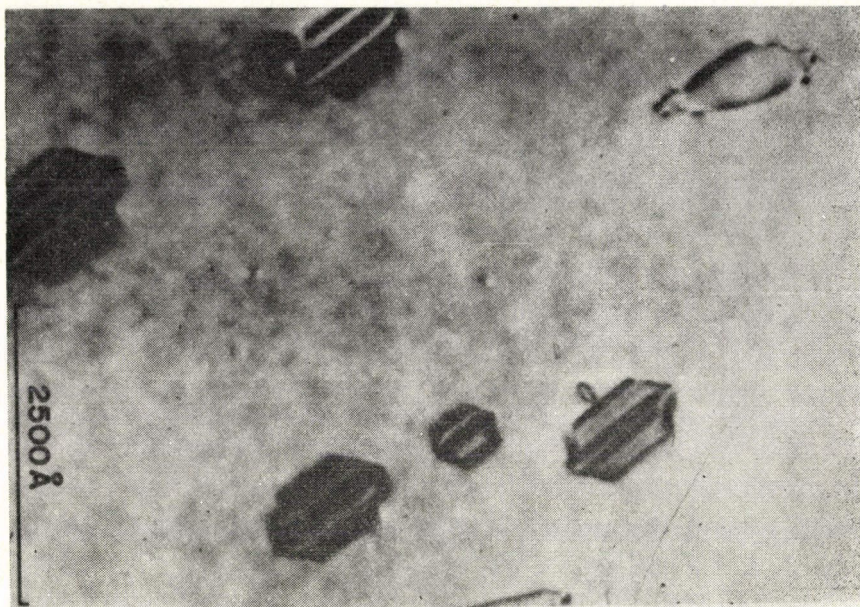
1. ábra. a) vakancia, b) intersticiális típusú hurkok

4.1.1. Frank-féle rögzült hurkok

A Frank-féle rögzült hurkok olyan (111) síkokon levő, a hurok síkjára merőleges, $1/3$ [111] Burgers-vektorú parciális diszlokáció, amely körülkerít egy (111) síkú, intrinsic rétegződési hibát [1]. A Frank-féle rögzült hurkok keletkezésekor a vakanciák úgy kondenzálódnak, hogy eltüntetnek egy (111) sík atomjainak a hurok által határolt részét. Ezen hurkok megfigyelése és azonosítása Frank nevéhez fűződik [7].

A Frank-féle hurkok alakját meghatározza az, hogy a határoló Frank-féle rögzült diszlokációk az (111) síkokon vannak, és egymásba záródnak. Saada elméleti számításokat végzett arra nézve, hogyan alakul a hurkok alakja a vakancia koncentráció függvényében [8]. Az egyensúlyi alak hexagonális, az [110] iránnyal párhuzamos oldalakkal.

Ilyen hexagonális alakú, Frank-féle rögzült diszlokáció hurkok láthatók a 2. ábrán, nagytisztaságú alumínium mintáról készült elektronmikroszkópos felvételen. A hurkok belsejében jól megfigyelhető a jellegzetes rétegződési hiba kontraszt is [6].



2. ábra. Frank-féle rögzült diszlokáció hurkok

4.1.2. Prizmatikus hurkok

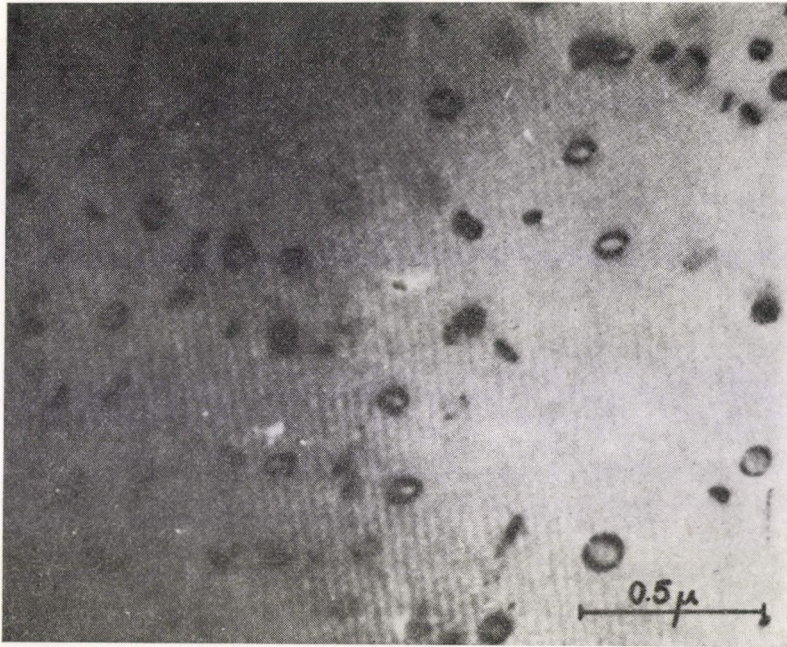
A prizmatikus hurkok olyan (110) síkokon levő, $1/2$ [110] Burgers-vektorú teljes diszlokációkból állnak, amelyek egymásba záródnak, de nem kerítenek körül rétegződési hibát. Egyensúlyi alakjuk valószínűleg gyémánt szerkezetű, [112] irány-nyal párhuzamos oldalakkal [5]. Rétegződési hibát nem tartalmazó, prizmatikus hurkokat *Hirsch és munkatársai* figyeltek meg először, szintén alumíniumban [9].

A 3. ábrán látható elektronmikroszkópos felvétel ilyen prizmatikus hurkokról készült. Látható, hogy a hurkok belsejében nincsen rétegződési hiba kontraszt.

4.1.3. Prizmatikus hurkok keletkezése Frank-féle rögzült hurkokból

A prizmatikus hurkok a Frank-féle rögzült hurkokból is létrejöhetnek akkor, ha egy $1/6$ [11 $\bar{2}$] Burgers-vektorú Schockley-féle parciális diszlokáció végigsöpör a Frank-hurok területén, miközben megszünteti a rétegződési hibát, és reakcióba lép a határoló Frank-féle parciális diszlokációkkal az alábbi egyenlet szerint:

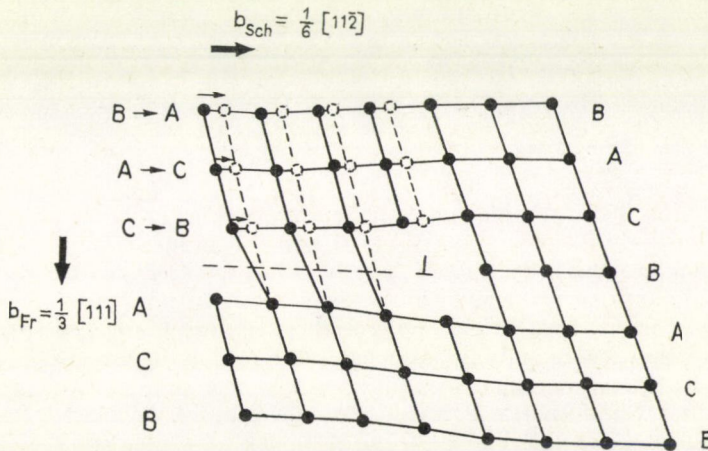
$$\frac{1}{6} [11\bar{2}] + \frac{1}{3} [111] = \frac{1}{2} [110]. \quad (2)$$



3. ábra. Prizmatikus hurkok

Így az (111) síkon kialakul egy rétegződési hibát nem tartalmazó, $1/2 [110]$ teljes diszlokációk által határolt prizmatikus hurok a Frank-féle hurok helyén, amely azonban mechanikailag instabil, és idővel befordulhat a Burgers-vektorokra merőleges (110) síkba.

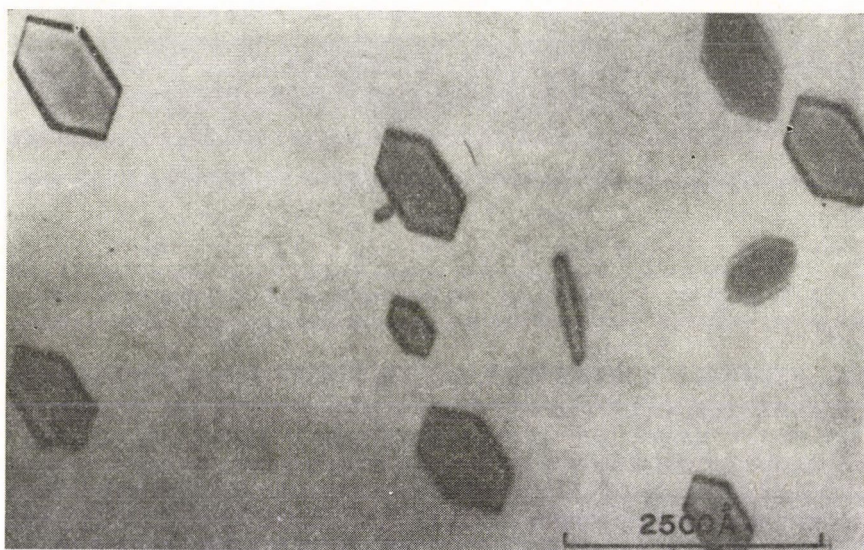
A rétegződési hiba eltűnését jól szemlélteti a 4. ábra. A Frank-féle rögzült



4. ábra. Rétegződési hiba megszűnése

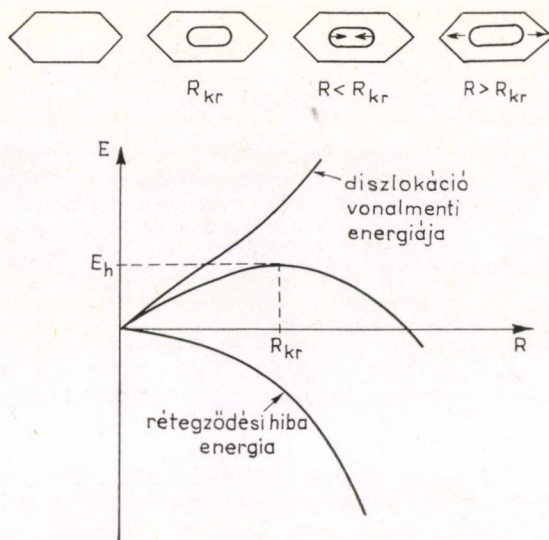
diszlokáció együtt jár egy rétegződési hibával, amit jelen esetben egy B sík részleges hiánya jelent. A $b_{sh}=1/6 [11\bar{2}]$ Burgers-vektorú Shockley-féle parciális diszlokáció azonban mozgása során — amint az a 4. ábrán látható —, minden atomot elmozdít annyira, hogy a rétegződési hiba felett levő C síkból B sík lesz, és ennek megfelelően módosulnak a többi síkok is, ami a rétegződési hiba megszűnését eredményezi.

Nagyobb rétegződési hiba energiájú fémekben a rétegződési hibák eltűnése a Frank-féle hurkokból az elektronmikroszkópos vizsgálatok során is megfigyelhető. Ennek az az oka, hogy az elektronsugár melegíti a mintát, lokális feszültségek keletkeznek az anyagban, amelyek Shockley-féle parciális diszlokációk nukleációját eredményezik. Ilyen, rétegződési hibát nem tartalmazó Frank-féle hurkok láthatók az 5. ábrán. Ebből a megfigyelésből arra következtettek, hogy egy bizonyos T_k hőmérséklet fölött a Frank-féle rögzült diszlokáció hurkok ún. hibátlanodása spontán lejátszódik. E hibátlanodási folyamat értelmezését Cotterill a következőkben adta meg [30].



5. ábra. Rétegződési hibát nem tartalmazó Frank-féle diszlokáció hurkok

A 6. ábra a hibás Frank-hurok belsejében nukleálódott Shockley-féle parciális diszlokáció hurok energiáját mutatja saját sugarának függvényében. Ez az energia két komponensből tevődik össze. Az egyik a Shockley-féle parciális diszlokáció vonal menti energiája, ami közelítőleg lineárisan növekszik az R sugárral. A másik komponens abból adódik, hogy a Shockley-hurok növekedése során rétegződési hibát szüntet meg, ami a Shockley-féle hurok területével, azaz R^2 -tel arányos energiacsökkenést eredményez. Az ábráról leolvasható, hogy egy kritikus R érték felett a Shockley-féle parciális diszlokáció hurok növekedése már energiacsökkenést jelent. R_{kr} fölött tehát a hurok növekedése már spontán végbemegy. A kritikus sugárhoz tartozó E_h érték a hibátlanodási folyamat aktiválási energiája.



6. ábra. A hibás Frank-hurokban nukleálódott Shockley-féle parciális diszlokáció hurok energiája saját sugarának a függvényében

A Shockley-féle parciális diszlokáció hurok energiája Nabarro szerint a következőképpen adható meg [10]:

$$E = \frac{Gb^2}{4} \left[1 + \frac{1}{1-\nu} \right] \left[\ln \frac{R}{r_0} - 0,61 \right] (1 + c_0) - \pi R^2 \gamma, \quad (3)$$

ahol G a nyírási modulus, b a Burgers-vektor, ν a Poisson-szám, r_0 a diszlokáció magjának sugara, c_0 az energiája, γ pedig a rétegződési hiba energia.

A (3) egyenletből szélsőértékszámítással R_{kr} meghatározható. Az így kapott R_{kr} (3)-ba való visszahelyettesítése után pedig E_h kiszámítható.

Ezek az értékek alumíniumban $\gamma = 170 \text{ erg/cm}^2$ érték mellett 12 \AA , illetve $1,7\text{--}2,5 \text{ eV}$ nagyságúnak adódtak.

E_h ismeretében kiszámítható az egységnyi térfogatban T hőmérsékleten kicsiny τ idő alatt hibátlanodott Frank-féle hurkok száma (n):

$$n = N A v_0 \tau \exp \left(-\frac{E_h}{kT} \right), \quad (4)$$

ahol N az összes hurkok száma egységnyi térfogatban, v_0 az atomi vibrációs frekvencia, A pedig egy entrópia faktor, amely közelítőleg egyenlő az eredeti hibás Frank-hurok területének és a kritikus Shockley-hurok területének arányával. Az a T_h hőmérséklet, amelyen τ idő alatt az összes hurok e -ad része hibátlanodik, a (4) egyenlet alapján a következő kifejezéssel adható meg:

$$T_h = E_h / k \ln (v_0 A \tau). \quad (5)$$

A T_h hibátlanodási hőmérséklet tehát az (5) összefüggés szerint E_h , A és τ függvénye. Az 1. táblázat különböző A és τ értékek mellett mutatja a T_h hőmérséklet nagyságát alumíniumban, $\gamma = 170 \text{ erg/mm}^2$, és $\nu_0 = 10^{13} \text{ sec}^{-1}$ értékekkel számolva [5].

1. TÁBLÁZAT

Frank hurkok eltűnési hőmérséklete
 $R_{rk} = 1,2 \text{ nm}$, $E_h = 1,71 \text{ eV}$ esetén
 különböző A és τ értékeknél

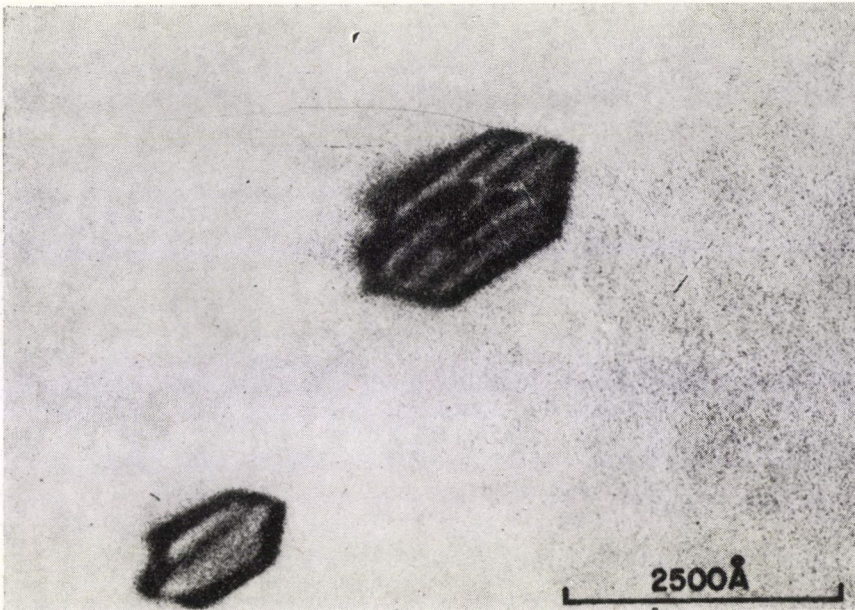
A	$\tau(\text{sec})$	$T_h/^\circ\text{C}$
10	1	345
	60	274
10^2	1	303
	60	247
10^3	1	267
	60	213
10^4	1	235
	60	187

A T_h hibátlanodási hőmérséklet ismeretében megjósolható, hogy az edzési folyamat körülményeitől függően hibás, vagy rétegződési hibát nem tartalmazó hurok keletkezik-e. Ha edzés közben az üregek elérik a kritikus méretet és diszlokáció hurkoddá esnek össze mielőtt a hőmérséklet a T_h érték alá esett volna, Shokley-féle diszlokáció hurok is nukleálódik, azaz a hibátlanodási folyamat lejátszódik, és rétegződési hibát nem tartalmazó, prizmatikus hurok keletkezik. Amennyiben az üreg csak a T_h hőmérséklet alatt éri el a kritikus méretet, összeeséskor rétegződési hibát tartalmazó Frank-hurkok alakul ki. Ez az elmélet jól egyezik a kísérleti tapasztalatokkal. Megfigyelték ugyanis, hogy alacsonyabb hőmérsékletre edzve a mintát, nagyobb valószínűséggel képződnek hibás hurkok. Szennyezők jelenlétében azonban inkább hibátlan hurkok jönnek létre, mivel a szennyezők elősegítik a hurkok nukleációját.

Speciális körülmények között az egyszerű Frank-féle, illetve prizmatikus hurkoknál bonyolultabb képződmények is kialakulhatnak: ilyenek a duplán hibás, illetve a kettős hurkok.

4.1.4. Duplán hibás hurkok

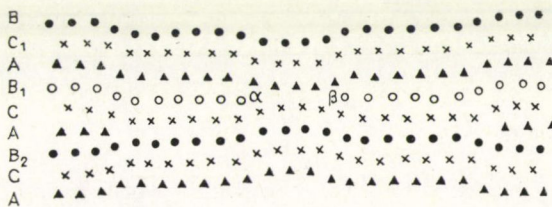
Yoshida és Shimomura tiszta alumíniumban, az olvadásponthoz közeli hőmérsékletre relative kis sebességgel edzve a mintát, a 7. ábrán látható képződményt figyelték meg elektronmikroszkóp segítségével [11]. A képen jól látható, hogy a külső hexagonális hurok belsejében egy trigonális alakú belső hurok helyezkedik el, és



7. ábra. Duplán hibás hurok

a rétegződési hiba kontraszt a belső gyűrűben a külsőhöz képest ellentétes fázisban van. Ebből arra következtettek, hogy a belső hurokban két, egymással párhuzamos rétegződési hiba fedi át egymást.

A duplán hibás hurkok keletkezése még nem egészen tisztázott. Yoshida és Shimomura szerint képződésük a késői, többszörös üregösszeesés következménye. A túl nagyra megnőtt üregek hirtelen összeesésekor egymástól egy atomsík távolságra két rétegződési hiba keletkezik, a 8. ábrán látható atomi elrendezés szerint.

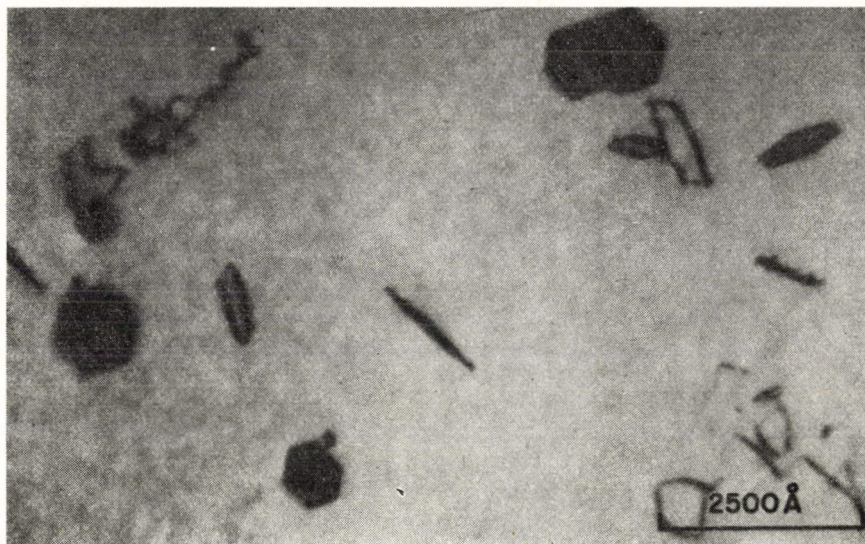


8. ábra. A duplán hibás hurokban javasolt atomi elrendezés

Egyre inkább teret hódít azonban az az elképzelés, hogy a duplán hibás hurkok ellenkezőleg, éppen egy túl korán bekövetkezett üregösszeeséskor jönnek létre. A korán kialakult hurokban levő rétegződési hiba további vakanciákat képes elnyelni. A vakancia annihilációs folyamat eredményeképpen a rétegződési hiba egy szomszédos síkra csúszik át [12], az átcsúszott tartomány határán pedig vakancia lépcső keletkezik [13].

4.1.5. Kettős prizmatikus hurok

Wilsdorf és Kuhlman—Wilsdorf szintén alumíniumban figyelte meg, hogy a prizmatikus hurkok néha párosával jelennek meg, egymástól néhány atomsík távolságra [14]. Ilyen kettős hurok látható a 9. ábrán.



9. ábra. Kettős hurok

A kettős hurkok keletkezésének valószínű oka a késői üregösszeesés. Ha az üreg viszonylag nagyra megnő, a későn bekövetkező kollapszus egyszerre különböző síkokon is végbemehet, ami két párhuzamos, egymástól néhány atomréteg távolságú hurok kialakulását eredményezheti. Mivel az így kialakult hurkok Burgers-vektora azonos, taszítják egymást, így hurok-pár alakul ki.

4.2. Rétegződési hiba tetraéderek

A rétegződési hiba tetraéderek négy, egymással nem párhuzamos (111) síkon levő rétegződési hibából állnak, amelyek egy tetraéder lapjait alkotják. A tetraéder [110] iránnyal párhuzamos élei $1/6$ [110] Burgers-vektorú „stair-rod” diszlokációk. A tetraéderek kis rétegződési hiba energiájú fémekben képződnek, vizsgálatukra modellanyagként legtöbbször aranyat használnak. Arany mintáról készült a rétegződési hiba tetraédereket bemutató 10. ábrán látható elektronmikroszkópos felvétel is.

A rétegződési hiba tetraédereket Silcox és Hirsch vizsgálta először [15]. Elképzelésük szerint a tetraéderek háromszög alakú Frank-féle rögzült hurkokból keletkeznek a 11. ábrán szemléltetett módon.



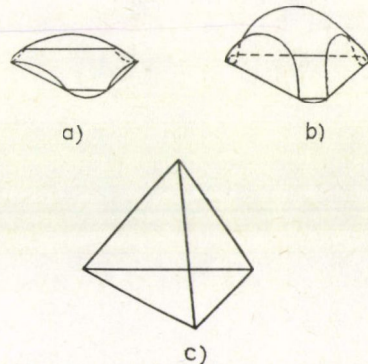
10. ábra. Rétegződési hiba tetraéderek

Első lépésként a három $[110]$ iránnyal párhuzamos, $1/3 [111]$ Burgers-vektorú Frank diszlokáció disszociál, és így három Shockley-féle parciális diszlokáció, illetve három stair-rod diszlokáció keletkezik (11.a. ábra) az alábbi reakció szerint:

$$\frac{1}{3} [111] = \frac{1}{6} [112] + \frac{1}{6} [110]. \quad (6)$$

Frank Shockley stair-rod

Ezzel a disszociációval a hurok energiája csökken. A három stair-rod diszlokáció az eredeti, disszociálatlan Frank-diszlokáció helyén marad, a Shockley-féle parciális diszlokációk pedig végigszaladnak a három, nem egyirányú (111) síkon, rétegződési hibát hagyva maguk után (11.b. ábra). A különböző (111) síkokon futó Shockley-féle parciális diszlokációk a síkok metszésvonalában találkoznak, és az alábbi reakció eredményeképpen keletkező újabb három stair-rod diszlokáció alkotja az így létrejövő tetraéder további éleit (11.c. ábra):



11. ábra. Rétegződési hiba tetraéderek keletkezése Frank-féle rögzült hurkokból

$$\frac{1}{6} [211] + \frac{1}{6} [121] = \frac{1}{2} [110]. \quad (7)$$

Több vizsgálat szól azonban amellett, hogy a rétegződési hiba tetraéderek rendszerint nem ezzel a mechanizmussal képződnek, hanem úgy, hogy egy néhány vakanciából álló csoport egyedi vakanciák abszorbeálásával növekszik [5].

5. Vakanciák eltűnése diszlokáció hurkokon, rétegződési hiba tetraédereken

A diszlokáció hurkok, illetve rétegződési hiba tetraéderek keletkezésük után további vakanciákat abszorbeálnak és ezáltal növekednek. A vakancia kondenzátumok mérete, R , és a bennük felhalmozódott vakancia koncentráció, C^* között az alábbi összefüggés áll fenn [16, 17]:

$$c^* = KR^2, \quad (8)$$

ahol a K konstans tartalmazza a rácsparamétert és a kondenzátumok (hurkok, tetraéderek) átlagos sűrűségét.

A vakancia elnyelés és a növekedés közben lejátszódó atomi folyamatok még nem teljesen ismertek. Feltételezhető, hogy a vakancia abszorpció eredményeképpen diszlokáció lépcső keletkezik, és a növekedés e lépcsőfok mozgásával történik [16, 1]. Kuhlman—Wilsdorf részletesen vizsgálta a lehetséges atomi folyamatokat rétegződési hiba tetraéderek esetében [18].

A diszlokáció hurkoknál, illetve a rétegződési hiba tetraédereknél a vakancia eltűnés sebessége a fentiek értelmében tehát függ a diszlokáció lépcsők nukleációjának és mozgásának sebességétől.

Kísérleti eredmények azt mutatják, hogy a vakancia elnyelődési folyamat gyorsabban játszódik le nagyobb túltelítettség esetén [19]. Ez a tapasztalat alátámasztja azt a feltevést, mely szerint a diszlokáció lépcsők nukleációjának hajtóereje a vakancia túltelítettség, és a nukleáció aktiválási energiája a vakancia túltelítettség növekedésével csökken [18].

A felülethez közeli hurkok növekedését a felület jelenléte erősen befolyásolja. A felület közelében versengés indul meg a felület és a vakancia kondenzátumok (diszlokáció hurkok, rétegződési hiba tetraéderek) között a vakanciákért. A felület tökéletes vakancia nyelő, ami definíció szerint azt jelenti, hogy a felület az odaérkező többletvakanciákat azonnal elnyeli, a tökéletes nyelők környezetében tehát mindig beáll az egyensúlyi vakancia koncentráció. A vakancia eltűnés sebessége tökéletes nyelők esetén csak a vakancia diffúzió sebességétől függ [16].

A fenti definíció értelmében a diszlokáció hurkok és a rétegződési hiba tetraéderek nem tökéletes nyelők, hiszen amint azt az előzőekben említettük, az odaérkező vakanciákat nem képesek azonnal abszorbeálni, a vakancia elnyelés sebessége a diszlokáció lépcsők nukleációs sebességének a függvénye.

5.1. Elnyelési hatékonyság

A diszlokáció hurkok, illetve rétegződési hiba tetraéderek vakancia elnyelési képességének jellemzésére definiálták az $\bar{\varepsilon}$ elnyelési hatékonyságot az alábbi összefüggés szerint [14]:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\bar{c}(t) - c_h(t)}{\bar{c}(t) - c(0)}, \quad (9)$$

ahol $\bar{C}(t)$ az átlagos vakancia koncentráció a t időpillanatban, $C_h(t)$ a hurkoknál levő vakancia koncentráció a t időpillanatban, $C(0)$ pedig az egyensúlyi

vakancia koncentráció. Az elnyelési hatékonyság tehát a (9) kifejezés szerint a hurkoknál, illetve tetraédereknél kialakuló aktuális vakanciaáram és a tökéletes nyelők esetén létrejövő ideális vakancia áram hányadosa. Értelemszerűen a tökéletes nyelők (pl. felület) elnyelési hatékonysága egységnyi. A diszlokáció hurkok és a rétegződési hiba tetraéderek esetén az elnyelési hatékonyság kisebb mint egy, hiszen az odaérkező többletvakanciákat nem tudják azonnal elnyelni, így körülöttük a pillanatnyi vakancia koncentráció az egyensúlyinál mindig valamivel nagyobb:

$$c_h(t) > c(0). \quad (10)$$

Ugyanakkor a (9) összefüggésből látszik az is, hogy az elnyelési hatékonyság értéke függ a vakancia túltelítettség mértékétől. Nagyobb túltelítettség esetén az elnyelési hatékonyság is nagyobb, ami összhangban van azzal, hogy a vakanciák eltűnésekor képződő diszlokáció lépcsők nukleációjának hajtóereje a vakancia túltelítettség.

A rétegződési hiba tetraéderek növekedését, illetve a felület közelségének e növekedést befolyásoló hatását *Siegel* és *munkatársai* vizsgálták részletesen [16]. Elméleti és kísérleti vizsgálatok egybevetésével meghatározták a rétegződési hiba tetraéderek elnyelési hatékonyságát aranyban. Később *Lam és munkatársai* hasonló vizsgálatot végeztek alumíniumban a diszlokáció hurkokra vonatkozóan [17]. A következőkben ezeket a vizsgálatokat tekintjük át részletesebben.

5.2. Az elnyelési hatékonyság meghatározása

A vakanciakondenzátumok (diszlokáció hurkok, illetve rétegződési hiba tetraéderek) elnyelési hatékonyságának meghatározásakor abból indultunk ki, hogy a kondenzátumok mint vakancia nyelők befolyásolják a vakanciák diffúzióját.

Egy végtelen hosszú lemezt tekintve, amelyben a vakancia kondenzátumok N_0 sűrűsége állandó, a kezdeti $C_0 = C(x, 0)$ koncentrációban lévő, és az egymással versengő nyelőkhez (felület, illetve kondenzátumok) diffundáló nem egyensúlyi többlet vakanciákra az általános diffúziós egyenlet a következőképpen írható fel:

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - 2\pi N_0 \Gamma \bar{\varepsilon} R_{(x, t)}^{\text{eff}} \cdot c(x, t) \right], \quad (11)$$

ahol $\bar{\varepsilon}$ az elnyelési hatékonyság, $R_{(x, t)}^{\text{eff}}$ a vakancia kondenzátum effektív sugara, amely a valódi $R(x, t)$ mérettel rétegződési hiba tetraéderek esetén

$$R_{(x, t)}^{\text{eff}} = \frac{R(x, t)}{2}, \quad (12)$$

diszlokáció hurkok esetén pedig

$$R_{(x, t)}^{\text{eff}} = \frac{2}{\pi} R_{(x, t)} \quad (13)$$

alakban adható meg [20]. A Γ érték a hurkoknak, illetve a tetraédereknek a saját hatásgömbjükhöz képesti relatív növekedését fejezi ki, D a diffúziós állandó. A továbbiakban a problémát leegyszerűsítendő, a D , Γ és $\bar{\varepsilon}$ értékeket állandónak tekintjük.

A (11) diffúziós egyenletben a jobb oldal második tagja a kondenzátumoknál mint nyelőknél történő vakancia eltűnést írja le, és megegyezik a kondenzátumokban felhalmozott pillanatnyi $C^*(x, t)$ vakancia koncentráció idő szerinti megváltozásával [13].

Érdekes a (11) egyenletet átranzszformálni a közvetlenül mérhető $R(x, t)$ változóra. $C^*(x, t)$ a (8) egyenlet szerint kifejezhető a pillanatnyi $R(x, t)$ mérettel. Ezt figyelembe véve $C^*(x, t)$ időszerinti megváltozása a következő alakú:

$$\frac{\partial C^*(x, t)}{\partial t} = 2KR(x, t) \frac{\partial R(x, t)}{\partial t}, \quad (14)$$

ahol K értéke diszlokáció hurkok esetén $3/2 N_0 a$, a rétegződési hiba tetraéderek-nél pedig $N_0/a^2 N_a$, ahol N_a az egységnyi térfogatban levő atomok száma, a pedig a rácsparaméter. A kondenzátumokban felhalmozott pillanatnyi $C^*(x, t)$ többlet-vakancia koncentráció idő szerinti megváltozása azonban egyenlő a (11) egyenlet jobb oldalának második tagjával, vagyis:

$$\frac{\partial C^*(x, t)}{\partial t} = 2\pi N_0 \Gamma D \bar{E} R(x, t) c(x, t). \quad (15)$$

A (14) és (15) egyenletekből $c(x, t)$ és $R(x, t)$ között a következő összefüggés adódik:

$$\frac{\partial R(x, t)}{\partial t} = \pi a^2 D N_0 \Gamma \bar{E} c(x, t). \quad (16)$$

Ennek segítségével, illetve megfelelő kezdőfeltételek figyelembevételével a (11) egyenlet a következőképpen írható át az $R(x, t)$ változóra:

$$\frac{\partial R(x, t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2} - \pi N_0 \Gamma \bar{E} (R(x, t))^2 - (R_{\infty, \infty})^2 \right]. \quad (17)$$

A kísérleti eredmények értelmezésére a (17) egyenletnek csak az időben állandó, stacioner megoldására van szükség [16], így a $w(x, t) = \frac{R(x, t)}{R_{\infty, \infty}}$ változó bevezetésével a következő differenciálegyenletet kell megoldanunk:

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial x^2} = \pi N_0 \Gamma \bar{E} R_{\infty, \infty} [(w(x, t))^2 - 1]. \quad (18)$$

A (18) egyenletre a megfelelő határfeltételek figyelembevételével [16] a változók szeparálása után a következő megoldás adódik:

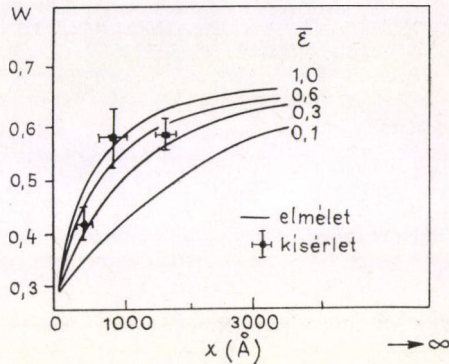
$$X = \left[\frac{3}{2\pi N_0 \Gamma \bar{E} R_{\infty, \infty}} \right]^{1/2} \int_{w_0}^w \frac{dw}{(w^3 - 3w + 2)^{1/2}}, \quad (19)$$

amely összefüggést ad a felülettől mért x távolság, illetve az x helyen levő kondenzátum relatív mérete (w) között.

A (19) egyenletben a meghatározandó $\bar{\varepsilon}$ értéken kívül már csak mérhető mennyiségek vannak, N_0 , X és $w = \frac{R(x, t)}{R(\infty, \infty)}$. A kondenzátumok állandónak feltételezett N_0 sűrűségét és az $R(x, t)$ pillanatnyi méretet a felülettől mérve az x távolság függvényében elektronmikroszkóp segítségével határozták meg [16, 17]. A mért adatok ismeretében különböző $\bar{\varepsilon}$ értékek mellett felvették a (19) összefüggésből adódó elméleti $x(w)$ görbéket, és összehasonlították a kísérleti úton közvetlenül kapott $x(w)$ görbével. Azt az $\bar{\varepsilon}$ értéket fogadták el helyesnek, amelyik mellett a kísérleti és az elméleti görbék a legjobban egybeesnek.

A 12. ábra Siegel és munkatársai eredményeit mutatja. A grafikonról egyrészt leolvasható, hogy a rétegződési hiba tetraéderek elnyelési hatékonysága ebben az esetben 0,6, másrészt látható, hogy a felülettől távolodva a tetraéderek mérete egy ideig nő, de egy bizonyos távolság után már nem változik. A felülethez közel eső tetraéderek nem tudnak olyan nagyra megnőni, mint a távolabb levő kondenzátumok, mivel a felület „elszívja” előlük a vakanciák egy részét. Ez az „elszívó hatás” azonban — amint a 12. ábrán is látható —, a felülettől való távolsággal csökken, és eléggé messzire menve meg is szűnik, így egy bizonyos távolság után a felület már nem befolyásolja a kondenzátumok növekedését.

Lam és munkatársai a 12. ábrán látható görbéhez hasonló $X(w)$ összefüggést állapítottak meg a diszlokáció hurkokra vonatkozóan.



12. ábra

6. Összefoglalás

A dolgozatban rövid áttekintést adtunk arról, hogy a fémekben a befagyasztással, illetve besugárással keltett többletvakanciák kondenzációja hogyan megy végbe, és e folyamatok milyen képződmények kialakulásához vezetnek.

Megállapítottuk, hogy a vakancia kondenzátumok nagyobb méretű vakancia üregek összeesésekor keletkeznek. A nagy rétegződési hiba energiájú fémekben főleg diszlokáció hurkok, a kis rétegződési hiba energiájú fémekben pedig rétegződési hiba tetraéderek jönnek létre, amelyek keletkezésük után a túltelítettség mértékétől függően a környezetükből további vakanciákat képesek felvenni, s ezáltal növekednek. Ezt a vakancia elnyelődési folyamatot a felület — mint jó vakancia nyelő — jelenléte erősen befolyásolja.

IRODALOM

1. Kovács I. és Zsoldos L.: Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
2. Kovács I.: Fizikai kézikönyv műszakiaknak, szerk. Antal J., Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1980. p. 889.
3. Vörös Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, megjelenés alatt.
4. Kovács I. és Szenes Gy., Magyar Fizikai Folyóirat, megjelenés alatt.
5. R. M. J. Cotterill, M. Doyama, J. J. Jackson and H. Meshii, Lattice Defects in Quenched Metals, Academic Press, New York, London, 1965.
6. Kovács I., Magyar Fizikai Folyóirat, 26, 503, 1978.
7. F. C. Frank, Proc. Phys. Soc. A62, 202, 1949.
8. G. Saada, Acta Met. 7, 367, 1959.
9. P. B. Hirsch, J. Silcox, R. E. Smallman and K. H. Westmacott, Phil. Mag. 3, 897, 1958.
10. F. R. N. Nabarro, Adv. Phys. 1, 269, 1952.
11. S. Yoshida and Y. Shimomura, J. Phys. Soc. Japan, 18, 1590, 1960.
12. F. W. Schapink and M. de Jong, Acta Met. 12, 755, 1964.
13. P. B. Hirsch, Phil. Mag. 7, 67, 1962.
14. D. Kuhlman—Wilsdorf and H. G. F. Wilsdorf, J. Appl. Phys. 31, 516, 1960.
15. J. Silcox and P. B. Hirsch, Phil. Mag. 4, 72, 1959.
16. R. W. Siegel, R. W. Baluffi and L. E. Thomas, Acta Met. 16, 7, 1968.
17. Nghi Q. Lam, H. A. Hoff, P. R. Okamoto and R. W. Siegel, Acta Met. 27, 799, 1978.
18. D. Kuhlman—Wilsdorf, Acta Met. 13, 257, 1965.
19. R. W. Siegel, Phil. Mag. 13, 337, 1966.
20. C. P. Flynn, Phys. Rev. 133, 587, 1964.

5. KIVÁLÁSOK ÉS ÖTVÖZŐATOM-CSOPORTOK DEFORMÁCIÓI

LENDVAI JÁNOS

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés	371
2. A magképződési folyamat modellje	371
3. Deformációs energia homogén magképződési folyamatokban	372
3.1. Inkoherens magképződés	372
3.2. Koherens magképződés	374
3.3. A magképződési folyamat aktiválási energiája	377
4. Heterogén magképződés	379
5. Összefoglalás	380
Irodalom	381

1. Bevezetés

Az ötvöződúsulások és kiválások kialakulása — kivételes esetektől eltekintve — térfogatváltozással jár. Az ezzel kapcsolatban fellépő deformációs energia lényegesen befolyásolja a szilárd fázisban lejátszódó magképződési folyamatokat. A térfogatváltozás következtében rugalmas deformációk alakulnak ki a mátrixban és a keletkező részecskékben is. További járulékot adhat a deformációs energiához a koherens illeszkedéshez szükséges elmozdulások fellépése a részecske-mátrix határfelület környezetében. Jelen dolgozatban a magképződési folyamat kontinuummechanikai modelljének alapján megvizsgáljuk az inkoherens, majd a koherens részecskék homogén képződésekor fellépő deformációs energiákat és röviden kitérünk a heterogén magképződési folyamatokra is.

2. A magképződési folyamat modellje

Vizsgáljuk egy kisméretű β kristály keletkezését a nagyméretűnek feltételezett kiinduló α fázis közepén. Az átalakulás az alábbi modellfolyamatok eredményeként képzelhető el:

1. Kiemelünk egy kicsiny térfogatot az α fázis közepéből és ebben szabadon (feszültségmentesen) végbemegy az $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulás.

2. Az így keletkezett kicsiny β kristály felületén létrehozunk egy felületi erőrendszert, amely visszaállítja az átalakulás előtti alakját és méretét, majd visszahelyezzük az α mátrix közepén maradt üregbe.

3. Az α és β tartományokat érintkezési felületük mentén összeforrasztjuk.

4. A beépített felületi erőrendszert létrehozó kényszer megszüntetjük, ami után további deformációk kialakulásával (relaxáció) beáll az egyensúly.

Az ily módon keletkezett rendszer nyilvánvalóan mechanikai feszültségeket tartalmaz, melyeknek energiája hatással van a magképződési folyamat sebességére is. Az α és β fázisok határfelületén az elmozdulások és feszültségek folytonosak, tehát a keletkezett β mag az α mátrixszal *koherensen* illeszkedik. *Inkoherens* határfelülettel rendelkező β kristály képződése ugyancsak a fenti modellfolyamatokkal képzelhető el abban az esetben, ha az átalakult tartomány nyírási modulusa nullának tekinthető. Ebben a modellben a β fázis egy összenyomható folyadék módjára viselkedik, melynek térfogata feszültségmentes állapotban eltér az (1) rész-folyamatban kiemelt α térfogattól.

Magas hőmérsékleteken a diffúziós folyás sebessége nagy, a képlékeny alakváltozás nagyon alacsony feszültségek hatására megindul és így az átalakulással járó feszültségek megszűnnek. Alacsony hőmérsékleten a deformációs energia mértékét lényegében a magot körülvevő mátrix folyáshatára korlátozza. Itt azonban meg kell jegyezni, hogy ez a folyáshatár a makroszkopikus folyáshatárnál több nagyságrenddel nagyobb lehet, mivel a keletkező mag kis mérete miatt az átalakulási feszültségek a mátrixnak csak egy olyan kis térfogatában fejtik ki hatásukat, amelyben csupán elhanyagolható valószínűséggel fordul elő diszlokációforrás. Ezért a magképződéssel járó deformációs energia meghatározásakor a magot körülvevő mátrixot tökéletes kristálynak kell tekintenünk. Természetesen ez csak akkor igaz, ha a magképződés homogén módon megy végbe. Heterogén magképződés esetén a lokális folyás könnyebben beindulhat és így a deformációs energia csökken. Ebből a szempontból különösen a szemcsehatárok hatása jelentős, amelyek a magképződés aktiválási energiájában lényeges szerepet játszó felületi energia járulékon kívül a deformációs energiát is csökkentik.

3. Deformációs energia homogén magképződési folyamatokban

3.1. Inkoherens magképződés

Vizsgáljuk először egy inkoherens β részecske homogén magképződését az izotropnak feltételezett α mátrixban. A kontinuum-mechanikai számítások eredményeként [1—3] a keletkező β részecske egy atomjára jutó g_d deformációs energia járulék az α és β fázisbeli fajtérfogatokkal (v^α , illetve v^β) és a két fázis rugalmas állandóival *gömb alakú* mag esetén a következőképpen fejezhető ki:

$$g_d = 2\mu^\alpha C \frac{(v^\beta - v^\alpha)^2}{3v^\beta}, \quad (1)$$

ahol μ^α az α fázis nyírási modulusa,

$$C = \frac{3K^\beta}{3K^\beta + 4\mu^\alpha}, \quad (2)$$

K^β a β kristály térfogati rugalmassági állandója.

Ha a keletkező β részecske nem gömb alakú, akkor a következőképpen számíthatjuk ki a mag egy atomjára jutó deformációs energiát [1]. Jelöljük g_d^α -val, illetve g_d^β -val a β mag egy atomjára jutó deformációs energiát abban az esetben,

amikor a 3ϵ térfogatváltozás csak az α mátrix, illetve csak a β részecske tágulásával (összehúzódásával) megy végbe. Így, ha a β mag megvalósuló térfogata $(1+3C\epsilon)$ arányban nagyobb az átalakulás előtti térfogatnál, akkor ezen tartományban a kompresszió mértéke $3(C-1)\epsilon$. A deformációs energia az n atomot tartalmazó β részecskében így $n(C-1)^2 g_d^\beta$, az α mátrixban pedig $nC^2 g_d^\alpha$. Tetszőleges alakú részecskére tehát az atomonkénti deformációs energia a következő alakban írható:

$$g_d = (C-1)^2 g_d^\beta + C^2 g_d^\alpha. \quad (3)$$

A (3) kifejezésben szereplő g_d energia akkor minimális, ha

$$C = \frac{g_d^\beta}{g_d^\alpha + g_d^\beta}. \quad (4)$$

Ekkor

$$g_d = \frac{g_d^\alpha g_d^\beta}{g_d^\alpha + g_d^\beta} = C g_d^\alpha = (1-C) g_d^\beta. \quad (5)$$

Az (5) összefüggések szerint, ha például $g_d^\beta \gg g_d^\alpha$, akkor a β mag közelítőleg deformálatlan marad és $g_d \approx g_d^\alpha$. A deformációs energia α és β fázis közötti megoszlását a C paraméter értéke szabja meg, az α , illetve β fázisbeli deformációs energiák aránya ugyanis, a (3) és (4) egyenleteket figyelembe véve a következő:

$$\frac{C^2 g_d^\alpha}{(C-1)^2 g_d^\beta} = \frac{C}{1-C}. \quad (6)$$

Gömb alakú részecskére, ha a teljes deformációs energiát a mátrix veszi fel (azaz $g_d^\beta \gg g_d^\alpha$, vagyis $C \approx 1$)

$$g_d \approx g_d^\alpha = 2\mu^\alpha \frac{(v^\beta - v^\alpha)^2}{3v^\beta}. \quad (7)$$

Ezt az eredményt összehasonlítva (2)-vel, látható, hogy a $g_d^\beta \gg g_d^\alpha$ feltétel a $K^\beta \gg \mu^\alpha$ esetnek felel meg.

Az általánosabb alakú magokat, c, a, a féltengelyű forgási ellipszoidokkal közelítve Nabarro megállapította [4, 5], hogy a megfelelő deformációs energia a (7) összefüggéshez hasonló alakban írható fel, azaz

$$g_d \approx g_d^\alpha = 2\mu^\alpha \frac{(v^\beta - v^\alpha)^2}{3v^\beta} E\left(\frac{c}{a}\right), \quad (8)$$

ahol az $E(c/a)$ függvény írja le a deformációs energiának a részecske alakjától való függését. Nabarro néhány speciális esetre meghatározta az $E(c/a)$ függvény értékét. A $c/a = \infty$ határesetben, ami egy rúd, vagy tű alakú részecske modellje, a deformációs energiára

$$g_d^\alpha = \mu^\alpha \frac{(v^\beta - v^\alpha)^2}{2v^\beta} \quad (9)$$

adódik, tehát $E(\infty) = \frac{3}{4}$. Gömb alakú részecskére ($c/a = 1$) $E = 1$, míg a lemez

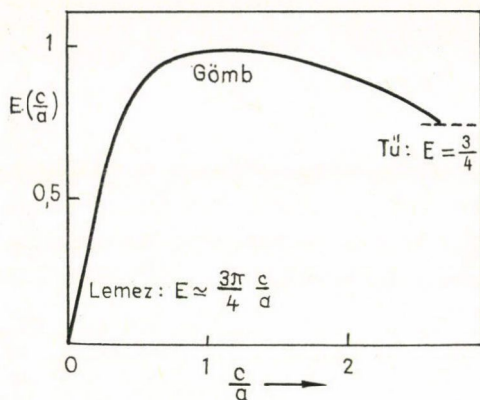
alakú részecskék ($c/a \ll 1$) esetére vonatkozó közelítő megoldás szerint

$$E(c/a) \approx 3\pi \frac{c}{4a}; \quad c/a \ll 1. \quad (10)$$

Feltételezve, hogy az $E(c/a)$ függvény simán és folytonosan változik, a függvény görbéje az 1. ábrán látható alakú lesz. A (8) összefüggés szerint az $E(c/a)$ függvény segítségével csak akkor adhatjuk meg a g_d deformációs energiát, ha $g_d^\beta \gg g_d^\alpha$. Ez a feltétel nyilván teljesül a $c/a \rightarrow 0$ esetben (lemez alakú magok), mivel ekkor $E(c/a)$ és így g_d^α is nullához tart.

Az eddigi megfontolások rugalmasan izotróp anyag esetére vonatkoztak. Kröner számításai szerint azonban [6] az 1. ábrán láthatóval lényegében azonos görbe adódik anizotrop kristályok esetén is.

Megállapíthatjuk tehát, hogy az inkoherezen képződő magok deformációs energiája a $c/a \ll 1$ esetben nagyon kis érték lehet, így ebből a szempontból a lapos részecskék képződése a legkedvezőbb. A kis c/a értékek esetén azonban a részecskék fajlagos felülete és ennek megfelelően a felületi energia járuléka igen nagy lesz. A legkedvezőbb részecske alak az lesz, amelyre a teljes szabad-entalpia növekedés a magképződés során minimális.



1. ábra. Inkohereens részecske deformációs energiájának alakfüggését jellemző $E(c/a)$ függvény [4]

3.2. Koherens magképződés

Vizsgáljuk most meg egy koherens β kristály képződését az izotropnak feltételezett α mátrixban. A továbbiakban az α és β fázisok rugalmas állandóit azonosaknak tekintjük (homogén térfogati hiba esete) [2, 3]. A feszültségmentes $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulást írja le az ε_{ij}^T tenzor, melyet ismertnek tételezünk fel. A szabadon átalakult β kristályt visszahelyezhetjük a mátrixban maradt üregbe, ha a $-\varepsilon_{ij}^T$ transzformációnak megfelelően alakját megváltoztatjuk, ezzel ugyanis az eredetileg kivágott alakot kapjuk vissza. Az ε_{ij}^T transzformációhoz tartozó σ_{ij}^T feszültségeket a Hooke-törvény alkalmazásával a következőképpen írhatjuk:

$$\sigma_{ij}^T = 2\mu\varepsilon_{ij}^T + \lambda\varepsilon^T\delta_{ij}; \quad (\varepsilon^T = \sum_j \varepsilon_{jj}^T). \quad (11)$$

Ha az eredeti alakra visszatranszformált β kristály visszahelyezése után az érintkezési felületeket összeforrasztjuk és a rendszert relaxálni hagyjuk, akkor a β és az α fázisban is deformációk lépnek fel. Ezeket a relaxáció során kialakuló deformációkat a β magban és az α mátrixban az ε_{ij}^C deformációs tenzorral írjuk le-

A relaxáció során a mátrixban kialakuló feszültség tehát:

$$\sigma_{ij}^c = 2\mu\epsilon_{ij}^c + \lambda\epsilon^c\delta_{ij}; \quad (\epsilon^c = \sum_j \epsilon_{jj}^c). \quad (12)$$

A β magban azonban a relaxáció előtt már volt $-\sigma_{ij}^T$ feszültség, ezért a relaxáció utáni állapotban az eredő feszültség

$$\sigma_{ij}^\beta = \sigma_{ij}^c - \sigma_{ij}^T. \quad (13)$$

A (11)—(13) összefüggések felhasználásával:

$$\sigma_{ij}^\beta = 2\mu(\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^T) + \lambda(\epsilon^c - \epsilon^T)\delta_{ij}. \quad (14)$$

A koherens magképződés során a deformációs energia az előbbi megfontolások alapján két részből tevődik össze. Az egyik rész azzal a munkával egyenlő, amit a β mag $-\epsilon_{ij}^T$ deformációjához (visszaalakításához) kell befektetnünk. Ez a járulék (a mag térfogatát V_β -val jelölve):

$$E_1 = \frac{1}{2} \int_{V_\beta} \sigma_{ij}^T \epsilon_{ij}^T dV. \quad (15)$$

A második rész a feszültségrelexációval kapcsolatos. Az egyensúlyi helyzet beállása során végzett munka [3]:

$$E_2 = -\frac{1}{2} \int_{V_\beta} \sigma_{ij}^T \epsilon_{ij}^c dV. \quad (16)$$

A teljes deformációs energia tehát:

$$E = E_1 + E_2 = \frac{1}{2} \int_{V_\beta} \sigma_{ij}^T (\epsilon_{ij}^T - \epsilon_{ij}^c) dV. \quad (17)$$

Figyelembe véve a

$$\sigma_{ij}^T \epsilon_{ij}^c = \sigma_{ij}^c \epsilon_{ij}^T \quad (18)$$

azonosságot, továbbá felhasználva a (14) egyenletet, (17) a következő alakra hozható:

$$E = -\frac{1}{2} \int_{V_\beta} \sigma_{ij}^\beta \epsilon_{ij}^T dV. \quad (19)$$

Tehát, ha ismerjük a konkrét magképződési folyamatot leíró ϵ_{ij}^T deformációkat, akkor a (19) összefüggés szerint kiszámíthatjuk a deformációs energiát, feltéve, hogy megtaláljuk az ϵ_{ij}^c deformációkat.

Az inkohérens magképződés vizsgálatához (3.1. pont) hasonlóan szorítkozunk most is csak forgási ellipszoid alakú részecskék esetére. Ilyenkor az ϵ_{ij}^c deformációk állandók és csak a részecske alakjától függenek, így a keletkező mag egy atomjára jutó deformációs energia járulék:

$$g_d = -\frac{1}{2} \cdot \sigma_{ij}^\beta \cdot \epsilon_{ij}^T v^\beta. \quad (20)$$

Az ellipszoid tengelyei által meghatározott koordinátarendszerben (az x_3 tengely mutasson a forgási ellipszoid c tengelyének irányába), a feszültségmentes átalakulás

(ε_{ij}^T) és a relaxáció utáni deformációk (ε_{ij}^C) közötti összefüggés a következő lesz:

$$\varepsilon_{ij}^C = \sum_{m,n} S_{ijmn} \varepsilon_{mn}^T, \quad (21)$$

ahol az S_{ijmn} paraméterek értékeit bizonyos elliptikus integrálok adják meg. A forgási ellipszoid alakú részecskék esetén ezek az elliptikus integrálok viszonylag egyszerű kifejezésekre redukálhatók [1, 2] és segítségével a (20) kifejezésben szereplő g_d deformációs energia meghatározható különböző, fizikai szempontból lényeges esetekre.

Például, ha a feszültségmentes transzformáció tiszta térfogati dilatáció, azaz

$$\varepsilon_{ij}^T = \frac{1}{3} \varepsilon^T \delta_{ij}, \quad (22)$$

akkor

$$\varepsilon^C = \sum_j \varepsilon_{jj}^C = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)} \varepsilon^T, \quad (23)$$

ahol ν a Poisson-szám. Felhasználva a (14) és (20) összefüggéseket, valamint az ε^C és ε^T közötti (23) kapcsolatot, az atomonkénti deformációs energiára a

$$g_d = \frac{2}{9} \left(\frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \mu \varepsilon^T \nu^2 \quad (24)$$

kifejezés adódik. Ez az összefüggés nem tartalmazza a mag alakját jellemző c/a hányadost, sőt általánosságban is bizonyítható [4], hogy a (24) kifejezés tetszőleges alakú részecske esetén érvényes állandó dilatáció esetén. Megjegyezzük továbbá, hogy a (24) kifejezés megegyezik az inkoherens gömb alakú részecskére érvényes (1) kifejezéssel, ha abban elhanyagoljuk az α és β fázisok rugalmas állandói közötti eltéréseket.

Második példaként tekintsük azt az esetet, amikor a feszültségmentes transzformáció főtengelei párhuzamosak a részecske főtengeleivel, a hosszváltozások azonban nem egyenlőek. Ekkor a transzformációt az

$$\varepsilon_{11}^T = \varepsilon_1; \quad \varepsilon_{22}^T = \varepsilon_2; \quad \varepsilon_{33}^T = \varepsilon_3 \quad (25)$$

összefüggésekkel definiálhatjuk, a keletkező mag egy atomjára eső deformációs energiára pedig a következő adódik:

$$g_d = \frac{\mu \nu^2}{1-\nu} (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + 2\nu \varepsilon_1 \varepsilon_2) - \frac{\mu \nu^2}{32(1-\nu)} \pi \frac{c}{a} \times \\ \times \{13(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2) + 2(16\nu - 1)\varepsilon_1 \varepsilon_2 - 8(1+2\nu)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\varepsilon_3 - 8\varepsilon_3^2\}. \quad (26)$$

Ebből a kifejezésből nyilvánvaló, hogy koherens illeszkedés esetén a deformációs energia járuléka a $c/a \rightarrow 0$ esetben sem csökken nullára, kivéve ha $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$.

Az eddigi példákban az ε_{ij}^T transzformáció főirányai megegyeznek az ellipszoid főtengeleinek irányával és a két fázis koherens illeszkedése ezen irányok mentén történő megnyúlások vagy összenyomások segítségével alakult ki.

Tekintsük most azt az esetet, amikor a feszültségmentes $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulás nyírás-sal megy végbe és tegyük fel, hogy

$$\varepsilon_{13}^T = \varepsilon_{31}^T = \gamma/2 \quad (27)$$

az ε_{ij}^T tenzor nullától különböző elemei. Ebben az esetben a g_d atomonkénti deformációs energiára a következő összefüggés adódik [1, 2]:

$$g_d = \mu v^\beta \frac{2-v}{8(1-v)} \pi \frac{c}{a}. \quad (28)$$

Ez az érték természetesen 0-hoz tart $c/a \rightarrow 0$ esetén, hiszen a nyírási deformáció a lapos részecske lapjára merőleges irányban lép fel. Ha a nyírási deformáció komponensei $\varepsilon_{12}^T = \varepsilon_{21}^T = \gamma/2$, akkor

$$\lim_{c/a \rightarrow 0} g_d = \frac{1}{2} \mu v^\beta \gamma^2 \quad (29)$$

adódik, ami azt jelzi, hogy ha a nyírás a részecske síkjában lép fel, akkor lapos részecskék esetén is véges marad a deformációs energia (nem tart nullához).

Eshelby eredményeit többen továbbfejlesztették anizotrop közegek esetére, ahol a mátrix és a részecske rugalmas állandói eltérőek [7–9], de továbbra is fenntartva az ellipszoid alak feltételezését.

Tetszőleges alakú koherens részecske esetére *Hacsaturján* adott általános megoldást anizotrop közegek esetén [10], a részecske és a mátrix rugalmas állandóit azonosnak tekintve. A megoldás lényege, hogy a deformációs energiát a reciprok-térben számítja ki, és a legkedvezőbb részecskealak és orientáció az lesz, amelyik ezt az energiát minimalizálja. Ezt a formalizmust sikerrel alkalmazták pl. Al-Cu és Cu-Be ötvözetekben képződő G. P. zónák leírására [11], spinodal-szétesésre [12], valamint a rugalmas állandók különbözőségét is figyelembe véve az Al-Mg-Zn ötvözőrendszerben képződő koherens MgZn₂ fázisok esetére [12].

A deformációs energia koherens mag esetén igen jelentős lehet. Pl. 10% térfogatváltozással járó homogén dilatációt feltételezve, a $\mu = 8 \cdot 10^{-10} \text{ Nm}^{-2}$ és $v = \frac{1}{4}$ értékekkel a (24) összefüggésből $3 \cdot 10^8 \text{ Jm}^{-3}$, azaz kb. 1,5–2 kJ/mól deformációs energia adódik és hasonló értéket kapunk néhány százalékos deformációkat feltételezve a koherens magképződés fent tárgyalt többi esetére is. Ezen energia értékek összemérhetők az átalakulás hajtóerejét szolgáltató kémiai szabad-entalpia változással, következésképpen a koherencia fokozatos megszűnése várható az átalakulás előrehaladásával, hacsak a deformáció értéke a részecske-mátrix határ-felületen nem kisebb, mint kb. 1%.

3.3. A magképződési folyamat aktiválási energiája

Az előzőekben meghatározott g_d deformációs energijárulékot elvileg könnyen figyelembe vehetjük a nukleációs folyamattal kapcsolatos szabad-entalpia változásban. Ha az α , illetve β fázis egy atomjára eső szabad-entalpiát — a deformáció hatását figyelmen kívül hagyva —, g^α -val, illetve g^β -val jelöljük, akkor egy n atomot

tartalmazó mag keletkezésekor a rendszer szabad-entalpiája

$$\Delta G = n(g^\beta - g^\alpha + g_d) + \eta \sigma n^{2/3} \quad (30)$$

értékkel változik, ahol η a részecske alakjától függő állandó, σ pedig a részecske-mátrix határfelület fajlagos energiája. A g_d deformációs energia tehát a folyamat hajtóerejét csökkenti. A (30) összefüggés alapján nyilvánvaló, hogy csak olyan átalakulási folyamatok lehetségesek, melyekre

$$g^\beta - g^\alpha + g_d < 0, \quad (31)$$

hiszen csak ebben az esetben csökkenhet elegendően nagy mag keletkezésekor a rendszer szabad-entalpiája. Ha a deformációs energiát figyelmen kívül hagynánk, akkor a keletkező mag alakja olyan lenne, hogy az $\eta \sigma n^{2/3}$ felületi energia a lehető legkisebb legyen adott n esetén. A részecske alakja azonban — mint az előbbiekből láttuk —, a g_d deformációs energia értékét is befolyásolja, így a magképződési folyamat azon az „úton” halad, amelyre a Δg függvény a méret és az alak függvényében a legkisebb maximumot (nyeregponthoz) veszi fel. A ΔG ezen nyeregponthoz értéke jelenti a legkedvezőbb úton történő $\alpha \rightarrow \beta$ átalakulás magképződési folyamatának aktiválási energiáját.

Tekintsük például a 3.1. pontban tárgyalt inkoherens magképződési folyamatokat. Láttuk, hogy az inkoherens magok deformációs energiája igen kis érték lehet lapos részecskék képződésekor, tehát — ismét forgási ellipszoidoknak tekintve a részecskéket —, kis c/a értékeknél. Ekkor azonban adott térfogatú mag esetén a felületi energia vesz fel igen nagy értéket. Az optimális alak azon véges c/a érték esetén valósul meg, amelynél a két ellentétesen változó energia járulékos összege a legkisebb növekedést adja ΔG -ben. Figyelembe véve a lapos forgási ellipszoid térfogata

$$V = \frac{4}{3} \pi a^2 c, \quad (32)$$

felületére az

$$A = \pi a^2 \left[2 + \frac{c^2}{a^2 \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}} \ln \left(\frac{1 + \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}}{1 - \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}} \right) \right] \quad (33)$$

összefüggéseket, valamint a (8) és (10) kifejezéseket, felírhatjuk a szabad-entalpia megváltozását n atomból álló mag képződésekor:

$$\begin{aligned} \Delta G = n \left[g^\beta - g^\alpha + \frac{\pi}{4} \frac{c}{a} \mu^2 \frac{(v^\beta - v^\alpha)^2}{v^\beta} \right] + \left[\frac{9\pi}{16} v^{\beta 2} \frac{a^2}{c^2} \right]^{1/3} \times \\ \times \left[2 + \frac{c^2}{a^2 \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}} \ln \left(\frac{1 + \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}}{1 - \left(1 - \frac{c^2}{a^2}\right)^{1/2}} \right) \right] \sigma n^{2/3}. \end{aligned} \quad (34)$$

A keresett nyeregpont azon kritikus n_c , c_c és a_c értékeknél lesz, melyeknél a

$$\left[\frac{\partial \Delta G}{\partial n} \right]_{c/a} = 0, \quad (35)$$

és a

$$\left[\frac{\partial \frac{c}{a}}{\partial n} \right]_n = 0 \quad (36)$$

egyenletek egyidejűleg fennállnak. Az így kapott n_c és c_c/a_c értékek jellemzik a legkedvezőbb mag kritikus méretét és alakját. A magképződési folyamat aktiválási szabad-entalpiáját ezen n_c , c_c és a_c értékeknek a (34) összefüggésbe való visszahelyettesítésével kaphatjuk meg.

4. Heterogén magképződés

A kritikus méretű mag keletkezéséhez szükséges energia lényegesen lecsökkenhet, ha a magképződés kristályhibákon megy végbe. A csökkenést egyrészt a deformációs és felületi energia járulék csökkenése, másrészt a kristályhiba eltűnése okozhatja. A kristályhibák jelenléte az oka annak, hogy a szilárd fázisban végbemenő magképződési folyamatok leggyakrabban heterogén módon játszódnak le.

Vizsgáljuk meg például a szemcsehatármenti nukleációt. Azon a helyen, ahol a részecske keletkezik a szemcsehatár eltűnik és a felszabaduló szemcsehatár-energia csökkenti a magképződés energiáját. Tegyük fel, hogy egy c és a tengelyekkel jellemzett lapos ellipszoid alakú β mag képződik egy szemcsehatár mentén az α fázisban. A mag felülete közelítőleg $2\pi a^2$ ($a \gg c$) lesz, a szemcsehatárnak pedig $a^2\pi$ nagyságú felülete szűnik meg. Az n atomból álló mag keletkezésekor tehát a szabad-entalpia változás a következő kifejezéssel adható meg:

$$\Delta G = n(g^\beta - g^\alpha + g_d) + 2 \left(\frac{9\pi}{16} v^{\beta\alpha} \frac{a^2}{c^2} \right)^{1/3} (\sigma - \sigma_h/2) n^{2/3}, \quad (37)$$

ahol σ_h a szemcsehatár fajlagos felületi energiája. A $\sigma_h = 2\sigma$ határesetben a magképződési folyamat energiagátja eltűnne, ilyen nagy különbség azonban a részecskemátrix határfelület energiája és a szemcsehatár energiája között általában nem várható, mivel az inkohere ns részecskék fajlagos határfelületi energiája közelítőleg azonos a szemcsehatárok fajlagos energiájával. A $\sigma = \sigma_h$ esetben a magképződés során a felületi energia járulék felére, az aktiválási energia pedig nyolcadára csökken. Még nagyobb a csökkenés, ha a nukleáció 3 vagy 4 szemcse találkozásánál történik, ekkor az aktiválási energia a homogén nukleációhoz képest 3 nagyságrenddel is csökkenhet. A szemcsehatármenti magképződést elősegíti az ötvöző atomok szemcsehatármenti szegregációja (l. 10. fejezetet) és a szemcsehatármenti gyors diffúzió is. A szemcsehatármenti magképződéssel analóg módon tárgyalható az egyéb felületi hibákon (szabad felületeken, rétegződési hibákon stb.) végbemenő heterogén magképződés is.

Az edzéssel vagy alakítással bevitt diszlokációk ugyancsak gyakran szerepelnek nukleációs helyekként kiválósos folyamatoknál. A diszlokációk mentén történő magképződést Cahn vizsgálta [13] inkoherens részecske-mátrix határfelület esetén. A képződési szabad-entalpia kifejezésében a térfogati és felületi járulékon kívül megjelenik a diszlokáció deformációs energiájának az új fázis térfogatára eső része, ami negatív, mivel a képződő mag térfogatában — a modell feltevése szerint —, megszűnik a deformáció. Így egy diszlokációvonal mentén keletkezett, r sugarú henger alakú mag egységnyi hosszúságú részére eső szabad-entalpia változás:

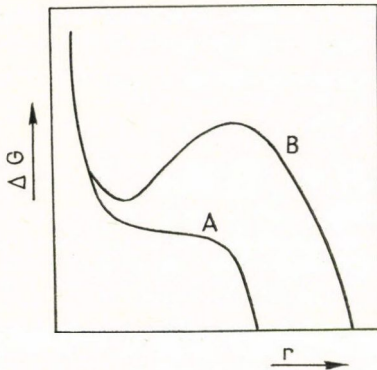
$$\Delta G = r^2 \pi \frac{g^\beta - g^\alpha}{v^\beta} + 2\pi\sigma r - A \ln r, \quad (38)$$

ahol az A együttható értéke a diszlokáció típusától függ [14]. Ha az átalakulással kapcsolatos g_a deformációs energia jelentős, akkor a (38) összefüggés első tagjában ezt is figyelembe kell venni. A képződési szabad-entalpia ezen kifejezésében két negatív járulék szerepel: a kémiai szabad-entalpia járulék, amely nagy r értékeknél dominál és a felszabaduló diszlokáció energia, amely kis r értékeknél jelentős. Közepes méreteknél a pozitív felületi járulék következtében ΔG nőhet, ez azonban nem szükséges. A $\partial \Delta G / \partial r = 0$ egyenlet megoldására ugyanis az

$$r = \frac{\sigma v^\beta}{2(g^\alpha - g^\beta)} [1 \pm (1 - \alpha)^{1/2}] \quad (39)$$

eredmény adódik, ahol

$$\alpha = \frac{2(g^\alpha - g^\beta)}{\pi v^\beta \sigma^2}. \quad (40)$$



2. ábra. Diszlokáció vonal mentén keletkezett mag képződési szabad-entalpiájának függése a részecske sugarától $\alpha > 1$ (A görbe) és $\alpha < 1$ (B görbe) esetén

lép fel (2. ábra, B görbe). A (39) összefüggésben szereplő paraméterek értékét megbecsülve r_0 -ra kb. 0,2 nm, r_c -re 1 nm adódik. Cahn megmutatta, hogy a diszlokáció mentén történő magképződés mintegy 10^{78} -szor gyorsabb, mint a homogén magképződés.

5. Összefoglalás

Az ötvözőatom-csoportok kialakulásakor fellépő deformációk hatását tárgyaltuk elsősorban a magképződési folyamatok szempontjából. Megmutattuk, hogy inkoherens részecskék esetén a deformációs energia lapos részecskék esetén elhanyagolhatóvá válik, ilyenkor azonban a felületi energia járuléka igen nagy lehet. Koherens magok esetén általában nincs olyan részecske alak, melynél a deformációs energia

eltűnne és így járuléka legtöbbször az átalakulási folyamat hajtóerejéhez viszonyítva is jelentős. Heterogén magképződés esetén a deformációs energia és a felületi energia is lényegesen lecsökkenhet. Ez az oka annak, hogy szilárd fázisban a magképződési folyamatok leggyakrabban heterogén módon játszódnak le.

IRODALOM

1. *J. W. Christian*: The Theory of Transformations in Metals and Alloys, Pergamon Press, Oxford, 1975.
2. *J. D. Eshelby*, Progress in Solid Mechanics, II. p. 89. North Holland, Amsterdam, 1961.
3. *Kovács I*, Magyar Fizikai Folyóirat, 18, 1970.
4. *F. R. N. Nabarro*, Proc. Roy. Soc., A175, 519, 1940.
5. *F. R. N. Nabarro*, Proc. Phys. Soc., 52, 90, 1940.
6. *E. Kröner*, Acta Met., 2, 301, 1954.
7. *L. J. Walpole*, Proc. Roy. Soc., A300, 270, 1963.
8. *N. Kinoshita and T. Mura*, Phys. Stat. Sol. 25, 759, 1971.
9. *R. J. Asaro and D. M. Barnett*, J. Mech. Phys. Solids, 23, 77, 1975.
10. *A. Hacsaturján*, Fiz. Tverd. Tyela, 8, 2709, 1966.
11. *J. A. Wert*, Acta Met., 24, 65, 1976.
12. *W. E. Mayo and T. Tsakalakos*, Metall. Trans. A. 11A, 1637, 1980.
13. *J. W. Cahn*, Acta Met., 5, 169, 1957.
14. *Kovács I. és Zsoldos L.*: Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1983. október 18. — Terjedelem: 8,05 (A/5 iv)
84-4375 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József igazgató

— MAGYAR —
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
— KÖNYVTÁRA —

Ára: 15 Ft
Előfizetés kötetenként: 90 Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

KRISTÁLYHIBÁK ELMÉLETE

Szerkesztette:
KOVÁCS ISTVÁN

I. RÉSZ

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bérces György</i> : Ponthibák rácsmodellje	293
<i>S. Tóth László</i> : Ponthibák és empirikus potenciálok	319
<i>Bérces György és Kovács István</i> : Vakanciák és vakanciakomplexek kétalkotós ötvözetekben ..	333
<i>Illy Judit</i> : Vakanciák kondenzációja	355
<i>Lendvai János</i> : Kiválások és ötvöző atomcsoportok deformációi	371

307 226

6

IV.

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

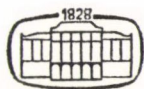
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 év terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár
Biofizikai Intézet
1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölik. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

KRISTÁLYHIBÁK ELMÉLETE

Szerkesztő:
KOVÁCS ISTVÁN

TARTALOMJEGYZÉK

II. RÉSZ

<i>Kovács István és Vörös György: Kristályhibák kontinuum modelljei</i>	385
<i>Tasnádi P., Juhász A. és Főzy I.: Szemcsehatár szerkezetek geometriai modelljei</i>	427
<i>Juhász A., Tasnádi P. és Főzy I.: Szemcsehatár szerkezetek fizikai modelljei</i>	439
<i>Rajkovits Zsuzsa: Szemcsehatár szegregáció</i>	459

6. KRISTÁLYHIBÁK KONTINUUM MODELLJEI

KOVÁCS ISTVÁN ÉS VÖRÖS GYÖRGY

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	386
2. Kristályhibák kontinuummechanikai leírása	386
2.1. A diszlokáció kontinuum modellje	387
2.2. Diszklínáció kontinuum modellje	388
2.3. Térfogati hibák kontinuum modellje	389
3. Általános meggondolások	390
3.1. A rugalmas pólusok fogalma	390
3.2. Rugalmas póluseloszlás elmozdulástere	391
3.3. Rugalmas pólusokat helyettesítő térfogati erők	391
3.4. Pólusok kölcsönhatása más deformáció terekkel	392
4. Kristályhibák leírása felületi póluseloszlással	394
4.1. Általános összefüggések	394
4.2. Vágási felülettel definiált kristályhibák (vonalhíbak)	395
4.3. Zárt felülettel definiált kristályhibák (térfogati hibák)	399
4.3.1. Homogén térfogati hiba	399
4.3.2. Dilatációs centrum tulajdonságai	400
4.3.3. Rugalmas inhomogenitás (indukált pólus)	402
4.3.4. Inhomogén térfogati hiba	403
5. Kristályhibák nemlokális rugalmasságtanban	403
5.1. A nemlokális rugalmasságtanról	403
5.2. Kristályhibák tulajdonságai	404
5.3. Kölcsönhatás dilatációs centrumok között	406
5.4. Éldiszlokáció és dilatációs centrum kölcsönhatása	407
6. Kristályhibák mikropoláros anyagokban	408
6.1. Bevezetés	408
6.2. A mikropoláros rugalmasságtan alapegyenletei	408
6.3. Kristályhibák modelljei mikropoláros anyag esetén	409
6.3.1. Vonalmenti hibák	409
6.3.2. Homogén térfogati hibák	410
6.4. Pólusokra vonatkozó általános meggondolások	411
6.4.1. A mikropoláros pólusok definíciója	411
6.4.2. A mikropoláros pólust helyettesítő térfogati erő és nyomaték	412
6.4.3. Pólusok kölcsönhatása más deformációs terekkel	413
6.5. Kristályhibák leírása felületi póluseloszlással	414
6.5.1. Általános összefüggések	414
6.5.2. Vágási felülettel létrehozott hibák (vonalhíbak)	415
6.5.3. Zárt felülettel határolt hibák	416
7. Transzverzális és longitudinális hullám konverzió rugalmas anyagokban pólusok által	417
7.1. Az átlagos erősűrűség és nyomatéksűrűség meghatározása	417
7.2. A hullámegyenlet előállítása	419
7.3. A hullámegyenlet megoldása	419
7.4. Az irányfüggés értelmezése	423
7.5. A rezonancia feltétele	423
7.6. Következtetések	425
8. Összefoglalás	425
9. Irodalom	425

1. BEVEZETÉS

A kristályhibák kvantitatív tulajdonságai elsősorban kontinuummechanikai modellek alapján határozhatók meg. A különböző típusú hibák (ponthibák, diszlokációk, diszklínációk, térfogati hibák stb.) vizsgálata során azonban általában különböző eljárásokat szoktak alkalmazni [1–7]. Ebben a dolgozatban a kristályhibák kontinuummechanikai tárgyalásának olyan általános megalapozását adjuk meg [8], amelynek felhasználásával valamennyi hiba kvantitatív tulajdonságai egységesen leírhatók. Az elmélet lehetőséget nyújt az eredmények nem klasszikus rugalmas kontinuumokra való általánosítására is. Így tárgyalni fogjuk a kristályhibák tulajdonságait nem-lokálisan rugalmas [9], és mikropoláros anyagok [10] esetén is.

A jelen elmélet és az előző tárgyalásmódok összehasonlításához a következő pontban röviden áttekintjük az előző eredményeket.

A dolgozatban alkalmazott eljárás a rugalmas pólusok fogalmán alapszik [11–13]. Leszármaztatunk a rugalmas pólusok hatásával egyenértékű tömegerőket. Ezek lehetővé teszik, hogy általános összefüggéseket határozzunk meg a rugalmas pólusok és ezektől független deformációs terek közötti kölcsönhatási energiára, erőre, forgatónyomatékokra stb. Az általános összefüggések birtokában definiáljuk azokat a rugalmas pólusokat, amelyek különböző felületek menti eloszlása eredményezi egy-egy adott típusú kristályhiba kialakulását.

2. KRISTÁLYHIBÁK KONTINUUMMECHANIKAI LEÍRÁSA

A kristályhibák rugalmas deformációk forrásait képezik az anyagban. Az elmúlt három évtized során nagy számú vizsgálat született ezen deformációk leírására a lineáris rugalmasságtan alapján. Egy hibához tartozó rugalmas elmozdulástér ismertetésében a hiba legfontosabb kvantitatív tulajdonságai, mint pl. a feszültségtér vagy a sajátenergiája meghatározhatók. Az eddigi elméleti vizsgálatokban a különböző hibák tulajdonságait különböző módon tárgyalták, megoldva a rugalmas alapegyenleteket az adott típusú hiba esetére. A következőkben röviden áttekintjük ezeket az eredményeket.

A klasszikus lineáris rugalmasságtan alapegyenletei:

$$\sigma_{ij,j} + \bar{f}_i = 0; \quad \sigma_{ij} = \sigma_{ji}, \quad (1)$$

ahol az ismétlődő indexek a szokásos összegzési konvenciót jelentik. σ_{ij} a feszültség-tenzor, amely a forgatónyomatékok eltűnése miatt szimmetrikus és \bar{f}_i a térfogati erő-sűrűség [5]. A feszültségtenzor az elmozdulásvektorral a következőképpen adható meg:

$$\sigma_{ij} = C_{ijlm} u_{l,m}, \quad (2)$$

ahol C_{ijlm} a rugalmas állandók tenzora (a vessző utáni index x_m szerinti deriváltat jelöl). Ezt a kifejezést (1)-be behelyettesítve az elmozdulásvektorra kapunk egy differenciálegyenletet:

$$C_{ijlm} u_{l,m,j} + \bar{f}_i = 0. \quad (3)$$

Ez az egyenlet kielégíthető a következő kifejezéssel:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int \bar{f}_i(\mathbf{r}') G_{li}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dV',$$

ahol az integrálást a test teljes térfogatára kell elvégezni és a $G_{ii}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ Green függvény tenzor a következő egyenletet elégíti ki:

$$C_{ijlm} G_{ln,mj}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \delta_{in} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0. \quad (4)$$

Itt $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ a Dirac delta függvény és δ_{in} a Kronecker delta.

Adott rugalmasságtani feladat esetén a (3) egyenlet olyan megoldását kell meghatároznunk, amely kielégíti a feladat által megszabott határfeltételeket is. A következőkben a hibát tartalmazó anyagot végtelen kiterjedésűnek tételezzük fel, és röviden összefoglaljuk a (3) egyenlet megoldásait a különböző kristályhibák esetén.

2.1. A diszlokáció kontinuum modellje

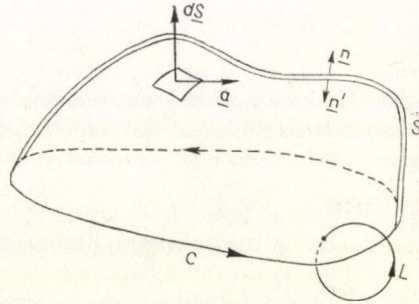
A kristályos testek képlékeny alakváltozása krisztallográfiai síkok mentén történő csúszásokkal megy végbe. Egy-egy elemi lépés során a csúszás nagysága egy atomtávolság nagyságú csúszásvektorral, a Burgers vektorral jellemezhető [14]. Az elcsúszás egy adott csúszási sík mentén általában csak részlegesen következik be, és ilyenkor az elcsúszott és még el nem csúszott tartomány határvonala a diszlokáció.

A diszlokáció fogalmát, mint a rugalmas deformációk egy lehetséges belső forrását először Volterra vezette be [15], majd Taylor [16], Orowán [17] és Polányi [18] ismerte fel alapvető szerepüket a kristályos testek képlékeny alakváltozásában.

A diszlokációk által okozott atomi elmozdulások leírása a diszkrét rácsmodell alapján jelenleg még nem megoldott feladat. A diszlokációvonal közvetlen környezetétől eltekintve az atomi elmozdulások azonban jól leírhatók a lineáris rugalmasságtan alapján. Az első ilyen vizsgálatot általános alakú diszlokációra Burgers végezte el [19], számos kérdés azonban még ma is vizsgálat tárgya [4].

A diszlokáció fogalma egyszerűen általánosítható kontinuumokra is [5, 6, 14]. Az 1. ábra mutatja egy tetszőleges, zárt C görbe mentén fekvő diszlokáció létrehozását. Vágjuk fel az anyagot gondolatban egy tetszőleges S felület mentén, amely a C görbében végződik. Az S felület normálisának pozitív irányát a görbe körüljárásának megfelelően a jobb csavar szabállyal rögzítjük le. Ha az S felület vágással kialakított két oldalát egymáshoz képest mindenütt egy állandó \mathbf{b} (Burgers) vektorral elmozdítjuk, majd a vágás hatását megszüntetjük, akkor a C görbe mentén egy diszlokáció keletkezik.

A fenti művelet eredményeképpen kialakuló rugalmas elmozdulásteret a következőképpen határozhatjuk meg. Hanyagoljuk el a térfogati erőket, ami kivételes esettől eltekintve mindig megengedhető. Szorozzuk meg a keresett $u_i(\mathbf{r})$ függvénnyel a (4) Green-függvény egyenletet és integráljuk a test teljes V' térfogatára, kizárva az integrálási tartományból az S vágási felületet egy S' zárt felülettel. Felhasználva, hogy



1. ábra. A C görbe mentén fekvő vonalhiba létrehozása a vágási felület két oldalának a vektorral történő relatív elmozdításával

végteles közegben $G_{lm}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{lm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, valamint a δ függvény definícióját, a következő kifejezést kapjuk:

$$u_n(\mathbf{r}) = - \int_{V'} C_{ijlm} G_{lm,mj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}') dV'. \quad (5)$$

A Gauss-tétel alkalmazásával, kihasználva, hogy az egyensúly feltétele most $\sigma_{lm,m} = 0$, a következő eredményre jutunk:

$$u_n(\mathbf{r}) = \int_{S'} (\sigma_{ik} G_{ln} + C_{iklm} u_i G_{lm,m}) dS'_k. \quad (6)$$

Tartson most az S' felület az S -hez. A feszültségeknek folytonosan kell áthaladniuk (az egyensúly miatt) a vágási felületen, ezért $\sigma_{lm}|_{S^+} - \sigma_{lm}|_{S^-}$. Az elmozdulásvektor azonban ugrást szenved a vágási felületen, mert $u_i|_{S^+} - u_i|_{S^-} = b_i$. E két összefüggés felhasználásával a diszlokáció által okozott elmozdulástér már megadható

$$u_n(\mathbf{r}) = C_{iklm} b_i \int_S G_{lm,m}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS'_k \quad (7)$$

alakban, ahol az integrál az S vágási felületre veendő.

Az elmozdulástér ismeretében a diszlokáció kvantitatív tulajdonságai meghatározhatók. A (7) egyenletből differenciálással megkaphatjuk a deformáció és feszültségteret a (2) egyenlet felhasználásával. Nyilvánvaló azonban, hogy még számos nyitott kérdés marad meg, amely további vizsgálatokat igényel. Pl. a diszlokációra más feszültségtér hatásából származó erő meghatározásához ki kell számítanunk a kölcsönhatási energiát [6, 14], majd ennek a diszlokáció helyfüggéséből származtatható az erő, ahogyan ezt a számítást Peach és Koehler elvégezte [20]. Az ilyen számítások azonban általában hosszadalmas matematikai és fizikai megfontolásokat igényelnek [1—6, 11, 21—23].

A (7) alatti eredményünkből úgy tűnik, hogy a diszlokáció tulajdonságai függenek a vágási felülettől. A 4.2. pontban megmutatjuk, hogy ez a függés csak látszólagos, a diszlokáció deformáció és feszültségtere kifejezhető a diszlokációvonal mentén vett integrálokkal [3], ami azt jelenti, hogy a diszlokáció tulajdonságai csak a C görbétől függenek és függetlenek a vágási felület megválasztásától.

2.2. Diszklínáció kontinuum modellje

Az előző pontban egy olyan hiba elmozdulásterét határoztuk meg, amely a vágási felület két oldalának merevtestszerű relatív elmozdulásaként keletkezett. A C görbe mentén létrehozható azonban egy hiba úgy is, hogy a vágási felület két oldalát merevtestszerű forgatással mozdítjuk el egymáshoz képest. Ilyen esetben a C görbe mentén keletkező hibát diszklínációnak nevezzük. Ezt a hibát sokáig nem tanulmányozták részletesen, mert ez végtelen nagy feszültségeket eredményez a diszklínációvonaltól végtelen távolságban. A hatvanas évek végétől azonban ezt a hibát is részletesen tanulmányozni kezdték [24—28], mert a másodrendű szupravezetőkben megjelenő fluxusvonalak kétdimenziós rácsában diszklínációkat találtak [29].

A diszklínáció elmozdulásterét a diszlokációéhoz hasonlóan határozható meg. Ebben az esetben az elmozdulásvektor ugrása a vágási felületen a következő kifejezéssel adható meg:

$$u_i|_{S^+} - u_i|_{S^-} = \varepsilon_{ipq} \Omega_p (x'_q - x_q^0) \quad (8)$$

ahol Ω_p a forgásvektor, $x'_q - x_q^0$ a forgástengely tetszőleges pontjából a vágási felület adott pontjába mutató vektor és ε_{ipq} a permutációs tenzor. Ezeket felhasználva a diszklínáció elmozdulásterére a következő eredményt kapjuk:

$$u_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ipq} \Omega_p C_{iklm} \int (x'_q - x_q^0) G_{lm,m}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dS'_k. \quad (9)$$

Ezen eredmény felhasználásával a diszklínációk kvantitatív tulajdonságai is le származtathatók. Nyilvánvaló azonban, hogy a további eredmények még bonyolultabban nyerhetők, mint a diszlokációk esetén. Ugyanis pl. a diszklínációra ható erő most függ a forgástengely megválasztásától is, amint ezt a közvetlen számítások is mutatják [30].

2.3. Térfogati hibák kontinuum modellje

Az extrém tisztaságú anyagoktól eltekintve a szilárdtestek mindig tartalmaznak térfogati hibákat idegen atomok vagy atomcsoportok, illetve kiválások formájában. Ezek a térfogati hibák szintén belső feszültségforrásokat képeznek, vagy azért mert a mátrix üregéhez képest kisebbek vagy nagyobbak, vagy mert a rugalmas állandóik különböznek a mátrixétól (ez utóbbit rugalmas inhomogenitásnak nevezzük). Az ilyen hibák jelentősen növelik a testek szilárdságát [31], ezért tulajdonságaik ismerete alapvetően fontos.

A térfogati hibák tulajdonságainak általános leírását először *Eshelby* adta meg [32, 7]. Eredményei szerint egy homogén térfogati hiba (a hiba rugalmas moduluszai megegyeznek a mátrixéval) elmozdulásterére végtelen közegben a következő kifejezéssel adható meg:

$$u_i(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \int_S G_{li}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varepsilon_{km}^T(\mathbf{r}') dS'_j, \quad (10)$$

ahol az integrálást a hiba felületére kell elvégezni. ε_{km}^T az ún. feszültségmentes transzformáció, amely azzal a deformációval egyenlő, amellyel a hibát képező test a feszültségmentes állapotából a mátrix üregének alakjára és nagyságára hozható. Feltéve, hogy a feszültségmentes transzformáció homogén a hibában és a mátrix izotrop, a homogén térfogati hiba tulajdonságai a (10) kifejezésből meghatározhatók [7, 32].

Az inhomogén (a mátrixétól különböző rugalmas modulusú) térfogati hiba és a rugalmas inhomogenitás tárgyalása visszavezethető ekvivalens homogén hiba meghatározására [32].

Rövid áttekintésünkéből kitűnik, hogy a különböző hibák tulajdonságainak kontinuummechanikai tárgyalása nem egységes elmélet alapján történt. Egy egységes elmélettől azt várjuk, hogy olyan általános összefüggésekre vezessen, amelyek egyaránt alkalmazhatók bármely típusú hibára. A következő pontban egy egységes elmélet alapjait foglaljuk össze.

3. ÁLTALÁNOS MEGGONDOLÁSOK

3.1. A rugalmas pólusok fogalma

Legyen f_j egy olyan erő, amely a rugalmas kontinuum egy adott \mathbf{r}' helyvektorú pontjában hat. A következőkben az ilyen erőket ponterőknek nevezzük. Egy ponterő által okozott elmozdulástér a Green-függvény jelentése alapján:

$$u_l(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = f_j(\mathbf{r}') G_{lj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (11)$$

A ponterők fogalmának felhasználásával a következőképpen definiálhatunk rugalmas pólusokat. Tegyük fel, hogy az \mathbf{r}' helyvektorú pont körüli kicsiny térfogatelemben N ponterő hat. Akkor (11) felhasználásával az eredő elmozdulástér a következő kifejezéssel adható meg:

$$u_l(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^N f_k^\alpha G_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{l}^\alpha), \quad (12)$$

ahol $\mathbf{r}' + \mathbf{l}^\alpha$ az f_k^α erő támadáspontjának helyvektora. Fejtsük Taylor-sorba a Green-függvényt az $(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ hely körül, akkor a következő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} u_l(\mathbf{r}) = & \left[\sum_{\alpha=1}^N f_k^\alpha \right] G_{lk}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \left[\sum_{\alpha=1}^N l_j^\alpha f_k^\alpha \right] G_{lk,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \\ & + \frac{1}{2} \left[\sum_{\alpha=1}^N l_j^\alpha l_m^\alpha f_k^\alpha \right] G_{lk,j'm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \dots, \end{aligned} \quad (13)$$

ahol a vessző az indexeken x_j szerinti deriválást jelöl. A sorfejtés el nem tűnő tagjai különböző rendű rugalmas pólusokat jellemeznek [11–13]. Ezek a pólusok képezik az alapvető forrásait a rugalmas szingularitásoknak. Mivel egyensúly esetén fenn kell állnia a

$$\sum_{\alpha=1}^N f_k^\alpha = 0, \quad \varepsilon_{ijk} \sum_{\alpha=1}^N l_j^\alpha f_k^\alpha = 0 \quad (14)$$

egyenlőségeknek, ezért a legegyszerűbb rugalmas pólus a

$$P_{jk} = \sum_{\alpha=1}^N l_j^\alpha f_k^\alpha = P_{kj} \quad (15)$$

szimmetrikus tenzorral jellemezhető, ahol az utolsó egyenlőséghez felhasználtuk a (14) alatti második egyenletet. Egy ilyen típusú ponthibát az irodalomban általában erő dipólusnak neveznek [11–13]. A jelen dolgozatban a P_{jk} tenzorral jellemezhető ponthibát rugalmas monopólusnak fogjuk nevezni, mert az elektromos monopólussal analógiában, ez a legegyszerűbb forrása a rugalmas elmozdulások terének. Ezzel a terminológiával egy p rendű multipólust jellemző tenzor definíciója:

$$P_{j k k_1 \dots k_{p-1}} = \sum_{\alpha=1}^N l_{k_1}^\alpha \dots l_{k_{p-1}}^\alpha \cdot l_j^\alpha f_k^\alpha. \quad (16)$$

3.2. Rugalmas póluseloszlás elmozdulástere

Egyedi ponterők nem létezhetnek az anyagban, hanem a hatásuk mindig a (15), illetve (16) pólusok formájában jelentkezik. Az ezekhez tartozó elmozdulástér leírásához tegyük fel most, hogy az \mathbf{r}' helyvektorú kicsiny térfogatelemben N rugalmas monopólus helyezkedik el. Akkor (13) alapján az eredő elmozdulástér a következő alakban adható meg:

$$u_l(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^N P_{jk}^{\alpha} G_{lk,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{l}^{\alpha}), \quad (17)$$

ahol $\mathbf{r}' + \mathbf{l}^{\alpha}$ a P_{jk}^{α} erősségű monopólus helyvektora. Fejtsük sorba a Green-függvény deriváltját az \mathbf{r}' hely körül, akkor az alábbi kifejezéshez jutunk:

$$u_l(\mathbf{r}) = P_{jk} G_{lk,j'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + P_{jkm} G_{lk,j'm'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{1}{2} P_{jkmn} G_{lk,j'm'n'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \dots, \quad (18)$$

ahol P_{jk} az eredő monopólus erősség, P_{jkm} az eredő dipólmomentum stb. Eredményünk egyes tagjai a különböző rendű pólusok elmozdulásterét adják meg.

3.3. Rugalmas pólusokat helyettesítő térfogati erők

A rugalmas pólusok hatását leírhatjuk egy fiktív térfogati erővel is, amelyet a következőképpen határozhatunk meg. A (18) sorfejtés alapján egy egyedülálló p rendű pólus elmozdulástere az

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{(p-1)!} P_{j k_1 \dots k_{p-1}}(\mathbf{r}') G_{lk,j'k'_1 \dots k'_{p-1}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (19)$$

alakban adható meg. Legyen F_i^p a p rendű pólushoz rendelhető fiktív térfogati erő, akkor (19) a következő egyensúlyi feltételt kell, hogy kielégítse:

$$C_{ijlm} u_{l,mj} + F_i^p = 0, \quad (20)$$

vagy behelyettesítés után ($j \rightarrow k, k \rightarrow n$ indexcserével)

$$\frac{1}{(p-1)!} C_{ijlm} P_{kn k_1 \dots k_{p-1}} G_{ln,k'k'_1 \dots k'_{p-1}mj} + F_i^p = 0. \quad (21)$$

Megszorozva a (4) egyenletet $P_{kn k_1 \dots k_{p-1}}/(p-1)!$ -sal és elvégezve a szükséges differenciálásokat, (21)-gyel való összehasonlítás után a p rendű pólus hatását helyettesítő térfogati erőre a következő eredményt nyerjük:

$$F_i^p(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{(-1)^p}{(p-1)!} P_{ki k_1 \dots k_{p-1}} \cdot \delta_{,k k_1 \dots k_{p-1}}, \quad (22)$$

ahol felhasználtuk, hogy $\delta_{,k'_i} = -\delta_{,k_i}$. Eredményünk alapján meghatározhatjuk egy tetszőleges pólus és az anyagban egyidejűleg jelenlevő, más forrásból származó deformáció tér kölcsönhatását jellemző paramétereket.

3.4. Pólusok kölcsönhatása más deformáció terekkel

Ha a pólus jelenlétében létre akarunk hozni egy másik ε_{ik}^A deformáció teret, akkor a pólus által keltett σ_{ik}^p feszültségek ellen is kell munkát végeznünk. E munkának megfelelő rugalmas energiát a pólus és az ε_{ik}^A deformáció tér kölcsönhatási energiájának nevezzük, amelynek nagysága a következő kifejezéssel adható meg [14]:

$$U(\mathbf{r}) = \int_V \sigma_{ik}^p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varepsilon_{ik}^A(\mathbf{r}') dV', \quad (23)$$

ahol az integrál a test teljes térfogatára veendő.

A pólusok olyan belső feszültségforrások, amelyektől származó erők egyensúly esetén eltűnnek a test határfelülete mentén, azaz

$$\sigma_{ik}^p \cdot n_k|_{S_0} = 0, \quad (24)$$

ahol n_k a test S_0 határfelületének normálisa. Ezt és (20)-at felhasználva (23) integrandusza a következőképpen alakítható át:

$$\sigma_{ik}^p \varepsilon_{ik}^A = \sigma_{ik}^p u_{i,k}^A = (\sigma_{ik}^p u_i^A)_{,k} - u_i^A \sigma_{ik,k}^p = (\sigma_{ik}^p u_i^A)_{,k} + F_i^p u_i^A. \quad (25)$$

Ezt (23)-ba behelyettesítve a jobb oldal első tagja felületi integrállá alakítható, ami (24) miatt eltűnik. A második tag (22) és a Dirac δ tulajdonságainak felhasználásával integrálható, amivel a kölcsönhatási energiára a következő kifejezést kapjuk:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{(p-1)!} P_{ki k_1 \dots k_{p-1}} \cdot \varepsilon_{ik, k_1 \dots k_{p-1}}^A. \quad (26)$$

A kölcsönhatási energia ismeretében vizsgáljuk meg a pólusra ható forgatónyomatékokat. Vizsgáljunk először egy monopólust. Ekkor a kölcsönhatási energia (26)-ból:

$$U(\mathbf{r}) = P_{ik} \varepsilon_{ik}^A(\mathbf{r}). \quad (27)$$

Rugalmas monopólusok úgy keletkezhetnek az anyagban, hogy egy adott pontjába (egy adott pont körüli kicsiny térfogatelembe) oda nem illeszkedő idegen (a mátrixtól különböző tulajdonságú) anyag kerül. Ennek következtében a kérdéses pont (térfogatelem) környezetében torzulások lépnek fel, amelyek mértéke egy szimmetrikus a_{lm} tenzorral jellemezhető. A pólusban működő erőhatásokat adott a_{lm} esetén az anyag rugalmas állandói határozzák meg, ezért a pólus erőssége a

$$P_{ik} = C_{iklm} a_{lm} \quad (28)$$

tenzorral adható meg.

A monopólusra ható forgatónyomatékokat úgy kaphatjuk meg, hogy gondolatban elforgatjuk a torzulást okozó objektumot eredeti helyzetéből a kristályhoz képest infinitézimálisan kicsiny φ szöggel. Ennek eredményeképpen a kölcsönhatási energia ΔU -val megváltozik, amelynek nagysága a

$$\Delta U = -\mathbf{M}\varphi \quad (29)$$

kifejezéssel adható meg, ahol \mathbf{M} a forgatónyomaték. Ebből \mathbf{M} kifejezhető a következőképpen

$$M_n = -U_{,\varphi_n}|_{\varphi=0}. \quad (30)$$

Az elforgatás hatása az a_{lm} tenzorra a következő transzformációval adható meg:

$$a'_{lm} = (\delta_{lj} + \varepsilon_{lpj} \varphi_p) (\delta_{mr} + \varepsilon_{mqr} \varphi_q) a_{jr}. \quad (31)$$

Felhasználva a (28) összefüggést, a (27) kölcsönhatási energia a következő alakba írható át:

$$U(\mathbf{r}) = \sigma_{lm}^A \cdot a_{lm}, \quad (32)$$

ahol felhasználtuk, hogy $\sigma_{lm}^A = C_{iklm} \varepsilon_{ik}^A$. Behelyettesítve (31)-et (32)-be és elvégezve a (30) alatti deriválást, a forgatónyomatékokra a következő eredmény adódik:

$$M_n^1 = \varepsilon_{nlj} a_{jm} \sigma_{lm}^A + \varepsilon_{nmr} a_{lr} \sigma_{lm}^A = 2\varepsilon_{nlj} \sigma_{lm}^A a_{jm}, \quad (33)$$

ahol a második tagban $m \rightarrow l$, $r \rightarrow j$, $l \rightarrow m$ összegző index cserét hajtottunk végre.

Alkalmazzuk eredményünket egy szimmetrikus dilatációs centrumra. Ez pl. úgy jön létre, ha az izotrop anyag egy pontjába egy kicsiny, de véges, gömbalakú testet kényszerítünk. Az ilyen monopólust jellemző a_{jm} tenzor a következő alakú:

$$a_{jm} = a \delta_{jm}, \quad (34)$$

ahol „ a ” a térfogatkülönbséget jellemző állandó. Nyilvánvalóan ilyen hibának tekinthető a mátrixtól eltérő méretű szubsztitúciós oldott atom köbös kristályban. Ha (34)-et (33)-ba helyettesítjük, akkor nullát kapunk az $\varepsilon_{nlj} \sigma_{lj}^A \equiv 0$ azonosság miatt. Egy szimmetrikus dilatációs centrumra tehát nem hat forgatónyomaték. Hasonlóan belátható, hogy tiszta hidrosztatikus feszültségterben tetszőleges monopólusra sem hat forgatónyomaték. Ezek az eredmények is indokolják az erődipólus helyett a rugalmas monopólus elnevezést.

Ha a_{jm} különbözik az egységtenzortól, akkor a monopólusra is hat forgatónyomaték. Az

$$\tilde{a} = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & 0 \\ 0 & 0 & a_3 \end{pmatrix}, \quad a_1 \neq a_2 \neq a_3 \quad (35)$$

tenzorral jellemezhető hibát tetragonális ponthibának nevezzük. Ha ebben pl. $a_2 = a_3 = a \neq a_1$, akkor egy ilyen hiba úgy keletkezik, ha az anyag egy pontjába egy forgási ellipszoid alakú kicsiny testet kényszerítünk, amelynek szimmetriatengelye az x tengellyel párhuzamos. Egy ilyen hibára ható forgatónyomaték komponensei (33)-ból:

$$M_1^1 = 0; \quad M_2^1 = 2\Delta a \sigma_{31}^A; \quad M_3^1 = -2\Delta a \sigma_{21}^A, \quad (36)$$

ahol $\Delta a = a_1 - a$.

Határozzuk meg még a másodrendű pólusra (dipólusra) ható forgatónyomatékot. Az ezt jellemző P_{ijk} tenzor (16) és (28) alapján a következő alakban adható meg:

$$P_{ijk} = \sum_{\alpha=1}^N l_k^\alpha \cdot P_{ij}^\alpha = C_{ijlm} \sum_{\alpha=1}^N l_k^\alpha a_{lm}^\alpha = C_{ijlm} a_{lmk}. \quad (37)$$

Ezt felhasználva a kölcsönhatási energia (26)-ból:

$$U^2(\mathbf{r}) = \sigma_{lm,k}^A \cdot a_{lmk}. \quad (38)$$

Alkalmazva erre a tenzorra a (29)-cel analóg forgatási transzformációt, a monopólusra vonatkozó gondolatmenet megismétlésével a másodrendű pólusra ható forgató-

nyomatékra a következő eredményt kapjuk:

$$M_n^2 = 2\varepsilon_{njl}\sigma_{lm,k}^A a_{jmk} + \varepsilon_{njik}\sigma_{lm,k}^A a_{lmj}. \quad (39)$$

Legyen most a másodrendű pólus egy valódi dipólus, azaz legyen $N=2$, és $a_{lm}^1 = -a_{lm}^2 = a_{lm}$. Ezekkel (37)-ből az

$$a_{lmk} = a_{lm} \cdot l_k \quad (40)$$

kifejezést nyerjük, ahol $l_k = l_k^1 - l_k^2$. Ezt és a (33) alatti kifejezést felhasználva a dipólusra ható forgatónyomaték az

$$\mathbf{M}^2 = \mathbf{I} \cdot \text{Grad } \mathbf{M}^1 - \mathbf{I} \times \text{grad } (\tilde{\sigma}^A \cdot \tilde{a}) \quad (41)$$

alakban adható meg. Az első tag a monopólusra ható nyomaték gradienseiből; a második tag pedig a két (ellenkező előjelű) monopólusra ható erő forgatónyomatékából származik. Látható, hogy általában a második tag tiszta hidrosztatikus feszültség-térben sem tűnik el.

4. KRISTÁLYHIBÁK LEÍRÁSA FELÜLETI PÓLUSELOSZLÁSSAL

4.1. Általános összefüggések

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a 2. pontban ismertetett valamennyi hiba tulajdonságai egységesen leírhatók meghatározott felület mentén eloszló rugalmas monopólusok segítségével.

Vegyünk fel a rugalmas kontinuumban egy tetszőleges S felületet és mozgítsuk el minden $dS'(\mathbf{r}')$ elemét $a_l(\mathbf{r}')$ -vel. Ezen elmozdulások eredményeként a felület mentén rugalmas szingularitások keletkeznek, amelyek erőssége a

$$da_{lm} = -\frac{1}{2}(a_l dS'_m + a_m dS'_l), \quad (42)$$

illetve a

$$dP_{ik} = -C_{iklm} a_l dS_m \quad (43)$$

tenzorokkal jellemezhető (az utóbbi egyenlőségben kihasználtuk, hogy $C_{iklm} = C_{ikml}$). A hiba teljes erőssége:

$$P_{ik} = -\int_S C_{iklm} a_l(\mathbf{r}') dS'_m. \quad (44)$$

A hiba által okozott eredő elmozdulástér (19) felhasználásával azonnal megadható a következő alakban:

$$u_n(\mathbf{r}) = \int_S G_{ni,k'} dP_{ik} = C_{iklm} \int_S G_{ni,k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') a_l(\mathbf{r}') dS'_m. \quad (45)$$

Hasonlóan megadható (32) felhasználásával a teljes kölcsönhatási energia is:

$$U = -\int_S \sigma_{lm}^A(\mathbf{r}') a_l(\mathbf{r}') dS'_m. \quad (46)$$

Ha a hiba egy másik rugalmas feszültségtérben helyezkedik el, akkor ez utóbbi konzervatív erőternek tekinthető. Ezért egy erőhatás leszámaztatható a kölcsönhatási energia negatív gradienseként, azaz (32) és (42) alapján

$$df_j^1 = \sigma_{lm,j}^A da_{lm} = \sigma_{lm,j}^A a_l dS_m. \quad (47)$$

Ez az összefüggés azonban még nem adja meg a hibára ható teljes erőt. Ehhez figyelembe kell vennünk még azt, hogy a $\tilde{\sigma}^A$ feszültségtértől minden felületelemen $\tilde{\sigma}^A dS$ nagyságú erő már eleve működik. A felületelem elmozdulása során ez az erő általában megváltozik, ezért a hiba elmozdulásakor ezt az erőváltozást is figyelembe kell vennünk. Az ebből származó erőhatás j irányú komponense:

$$df_j^2 = \sigma_{mj}^A(\mathbf{r}' + \mathbf{a}) dS'_m - \sigma_{mj}^A(\mathbf{r}') dS'_m = \sigma_{mj,l}^A a_l dS'_m. \quad (47a)$$

Ezzel az eredő erő a teljes felület mentén:

$$f_j = \int_S (df_j^1 + df_j^2) = \int_S (\sigma_{lm,j}^A + \sigma_{jm,l}^A) a_l dS_m. \quad (48)$$

A hibára ható forgatónyomaték (33) és (42) felhasználásával azonnal felírható:

$$M_n = \int_S \varepsilon_{njl} \sigma_{lm}^A (a_m dS'_j + a_j dS'_m), \quad (49)$$

vagy vektoralakban:

$$\mathbf{M} = \int_S d\mathbf{S} \times (\tilde{\sigma}^A \cdot \mathbf{a}) + \int_S \mathbf{a} \times (\tilde{\sigma}^A \cdot d\mathbf{S}).$$

4.2. Vágási felülettel definiált kristályhibák (vonalhíbak)

Az előző két pontban meghatározott összefüggések tetszőleges hiba esetén érvényesek. Adott típusú hibára vonatkozó alkalmazásuk az S felület és az a_l elmozdulások konkrét megadásával valósítható meg.

Definiáljuk először a hibát a következő ún. vágási felülettel. Vegyünk fel egy S , nyitott felületet az anyagban, amely a C görbében végződik, és vágjuk fel gondolatban az anyagot az S felület mentén. A 2.1. és 2.2. pont alapján világos, hogy ha az S felület két oldalát elmozdítjuk egymáshoz képest egy merevtestszerű translációval, amelyet az $a_l(\mathbf{r}') = b_l = \text{állandó}$ vektor jellemez, akkor a C görbe mentén egy diszlokáció keletkezik. Ha a felületek elmozdulását merevtestszerű forgatással, azaz az $a_l(\mathbf{r}') = \varepsilon_{lpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0)$ vektornak megfelelően hozzuk létre, akkor pedig egy diszklínáció keletkezik a C görbe mentén. Látható, hogy ha e vektorokat behelyettesítjük a (45) összefüggésbe, akkor rögtön megkapjuk a diszlokáció, illetve diszklínáció (7), illetve (9) elmozdulásterét. Minden további megfontolás nélkül megkapjuk a kölcsönhatási energiákat is a (46) egyenlet alapján.

Vizsgáljuk meg részletesen a most definiált vonalmenti hibákra ható erőt. Mivel most a (49) összefüggésben szereplő felület a C görbében végződik, és az integrálási tartományban a kölcsönható feszültségtér mindenütt folytonos és egyértékű, ezért a Stokes tétellel (49) átirtható. Alkalmazzuk a Stokes tételt a következő alakban:

$$\varepsilon_{jmk} \oint_C T dx'_k = \int_S (T_{,m} dS_j - T_{,j} dS_m); \quad T = \sigma_{lm}^A a_l, \quad (50)$$

illetve

$$\varepsilon_{lmk} \oint_C T dx'_k = \int_S (T_{,m} dS_l - T_{,l} dS_m); \quad T = \sigma_{jm}^A a_l, \quad (51)$$

ahol dx'_k a C görbe ívelem vektora. Felhasználva, hogy $\sigma_{lm,m}^A = \sigma_{jm,m}^A = 0$, a differenciálások elvégzése után a (48)-ban szereplő integrálok (50), (51)-ből kifejezhetők és a vonalhibára ható erőre a következő eredményt nyerjük:

$$f_j = - \oint_C (\varepsilon_{jmk} \sigma_{lm}^A + \varepsilon_{lmk} \sigma_{jm}^A) a_l dx'_k + \\ + \int_S [\sigma_{lm}^A a_{l,m} dS'_j - (\sigma_{lm}^A a_{l,j} + \sigma_{jm}^A a_{l,l}) dS'_m + \sigma_{jm}^A a_{l,m} dS'_l]. \quad (52)$$

Alkalmazzuk ezt a kifejezést először diszlokációra. Ekkor $a_l = b_l = \text{állandó}$ a vágási felület mentén, ezért a felületi integrál eltűnik. A diszlokációra ható eredő erő tehát független a vágási felülettől. (52) alapján definiálhatjuk a diszlokáció egyes ívelemeire ható erőt ($d\mathbf{x}$ -ről elhagyva a vesszőt):

$$df_j = \varepsilon_{jkm} \sigma_{lm}^A b_l dx_k + \sigma_{jm}^A \varepsilon_{mlk} b_l dx_k, \quad (53)$$

vagy vektor jelöléssel:

$$d\mathbf{f} = -(\tilde{\sigma}^A \mathbf{b}) \times d\mathbf{x} + \tilde{\sigma}^A (\mathbf{b} \times d\mathbf{x}). \quad (54)$$

Ebben az összefüggésben az első tag a jól ismert Peach—Koehler formula [20]. Az irodalomban jelenleg csak ez a kifejezés ismeretes a diszlokációra ható erőre vonatkozóan. Ez annak a következménye, hogy az eddigi megfontolásokban nem vették számításba a (47a) alatti erőjárulékot. Ebből származik az (54) alatti második tag. Ennek figyelembevétele jelentősen módosíthatja a diszlokációk dinamikai tulajdonságainak a tárgyalását, illetve az alakítási keményedésre vonatkozó elméleteket.

A Peach—Koehler erő elégtelenségére vonatkozóan már régóta vannak jelzések. Először Weertman utalt rá 1965-ben [33], hogy a Peach—Koehler erő tiszta hidrosztatikai feszültségek esetén is különbözhet nullától. Ez az eredmény fizikailag elfogadhatatlan, mert a diszlokáció mozgása nem jár térfogatváltozással, ezért hidrosztatikai feszültségek nem végezhetnek munkát a diszlokáció mozgása során. Ezért a Peach—Koehler erőnek csak a deviátor feszültségekre vonatkozóan szoktak értelmet tulajdonítani, amit termodinamikai megfontolással támasztanak alá (1. [2], 82. oldalt). Ez utóbbi azonban nem indokolt, a kölcsönhatás tiszta mechanikai természete miatt. Az (54) kifejezés esetén a probléma nem jelentkezik, tiszta hidrosztatikai feszültségtér esetén az eredő erő a diszlokációvonal minden ívelemén eltűnik.

A Burgers vektor állandósága miatt a diszlokáció tulajdonságai általában függetlenek a vágási felülettől. Ezt a deformáció, illetve feszültségtér esetén explicite is megmutathatjuk. Legyen a C görbe mentén fekvő diszlokáció végtelen közegben, ekkor $G_{ni}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{ni}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ és így pl. $G_{ni,k'} = -G_{ni,k}$. Ezt felhasználva a (45) alatti elmozdulástér gradiensét a következő alakban írhatjuk fel:

$$u_{n,p}(\mathbf{r}) = \int_S C_{iklm} G_{ni,kp} a_l dS'_m = \int_S C_{iklm} G_{ni,k'p'} a_l dS'_m. \quad (55)$$

Alkalmazzuk az (50) alatti Stokes tételt ($j \rightarrow p, k \rightarrow j$ indexcserével) a $T = C_{iklm} G_{ni,k} a_l$ függvényre. A differenciálások elvégzése után a kapott egyenletből (55) jobb oldala

kifejezhető és az elmozdulástér gradiensére a következő eredményt nyerjük:

$$u_{n,p} = \oint_C \varepsilon_{pmj} C_{iklm} G_{ni,k} a_l dx'_j + \int_S C_{iklm} G_{ni,km} a_l dS_k - \\ - \int_S C_{iklm} G_{ni,p'} (a_{l,p} dS'_m - a_{l,m} dS'_p). \quad (56)$$

Diszlokáció esetén a jobb oldal harmadik tagja zérus. A második tag pedig minden esetben nulla, mert a (4) egyenlet szerint

$$C_{iklm} G_{ni,km} = -\delta_{in} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}').$$

Az elmozdulástér csak a vágási felületen kívüli \mathbf{r} helyvektorú pontokban értelmezhető, ezért a δ függvény vágási felületre vett integrálja nulla. Ennek alapján tetszőleges C görbe mentén fekvő diszlokáció elmozdulásterének gradiense megadható a C görbe mentén vett vonalintegrállal, azaz

$$u_{n,p}(\mathbf{r}) = \oint_C \varepsilon_{pmj} C_{iklm} G_{ni,k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') b_l dx'_j. \quad (57)$$

Ez azt jelenti, hogy a diszlokáció deformációtere ($\varepsilon_{np} = (u_{n,p} + u_{p,n})/2$), illetve feszültségtere ($\sigma_{ik} = C_{iknp} \varepsilon_{np}$) nem függ a vágási felület megválasztásától. Mivel a diszlokáció sajátenergiája csak ez utóbbi két mennyiségtől függ, ezért a sajátenergia is független a vágási felülettől. Ez a megállapítás jól használható a sajátenergia számításakor.

Vizsgáljuk meg most részletesebben a vonalhibákra ható forgatónyomatékokot. A (49) kifejezés első tagjának átalakításához alkalmazzuk az (50) alatti Stokes tételt a $T = \varepsilon_{nil} \sigma_{lm}^A a_m x'_i$ függvényre, míg a második tag átalakításához a $T = \varepsilon_{njm} \sigma_{ij}^A a_l x'_k$ függvényre ($m \rightarrow i, k \rightarrow m$ indexcserével). Itt x'_k a C görbe egy ívelemének, illetve a felület egy elemének a helyvektorát jelenti. Kihasználva azt, hogy ha α_{ik} szimmetrikus tenzor, akkor $\varepsilon_{nik} \alpha_{ik} \equiv 0$, kissé hosszadalmas számolás után az eredő forgatónyomatéokra az alábbi eredményt nyerjük:

$$M_n = \oint_C \varepsilon_{nij} x_i (-\varepsilon_{jmk} \sigma_{lm}^A a_l + \sigma_{jm}^A \varepsilon_{mlk} a_l) dx'_k + \\ + \int_S \varepsilon_{nij} x'_i [(a_l \sigma_{jm,m}^A - a_m \sigma_{lm,j}^A) dS_l + a_l (\sigma_{lm,m}^A dS'_j - \sigma_{jm,l}^A dS'_m)] + \\ + \int_S \varepsilon_{nij} x'_i [\sigma_{jm}^A a_{l,m} - \sigma_{lm}^A a_{m,j}] dS_l + (\sigma_{lm}^A a_{l,m} dS'_j - \sigma_{jm}^A a_{l,l} dS'_m). \quad (58)$$

Diszlokáció esetén a harmadik tag ismét nulla. Az első tag az egyes ívelemekre ható, (52) alatti erők nyomatékát adja meg. A második tag akkor ad a forgatónyomatékhoz járulékokat, ha a kölcsönható feszültségtérnek van gradiense a vágási felület mentén. Ebben az esetben a diszlokációra ható forgatónyomaték nem független a vágási felülettől.

Az (58) alatti eredményből további következtetések is levonhatók. Látható, hogy tiszta hidrosztatikai feszültségtér esetén az eredő forgatónyomaték megegyezésben a (49) kifejezéssel, azonosan eltűnik. Felhasználva továbbá, hogy $\sigma_{jm,m}^A = 0$ (a kölcsönható feszültségtérnek nincsenek forrásai a vágási felület mentén), a disz-

lokációra ható forgatónyomaték a következő alakban írható fel:

$$M_n = \oint_C \varepsilon_{nij} x'_i (-\varepsilon_{jmk} \sigma_{lm}^A b_l + \sigma_{jm}^A \varepsilon_{mlk} b_l) dx'_k - \int_S \varepsilon_{nij} x'_i [b_l \sigma_{lm,j}^A + b_l \sigma_{jm,i}^A] dS'_m. \quad (59)$$

Ez éppen az (54) alatti vonalmenti erők, illetve a (47), (47a) felületi erők forgatónyomatékának a különbsége. Ez azt jelenti, hogy a két erőrendszer a diszlokációra ható eredő erő meghatározása szempontjából egymással egyenértékű, azonban a nyomatékaik már nem egyenértékűek, ha a feszültségtér gradiense nullától különböző a vágási felület mentén. Ha a feszültségtér homogén, akkor a diszlokációra ható eredő erő nulla és a forgatónyomaték csak a vonalmenti erők nyomatékából származik.

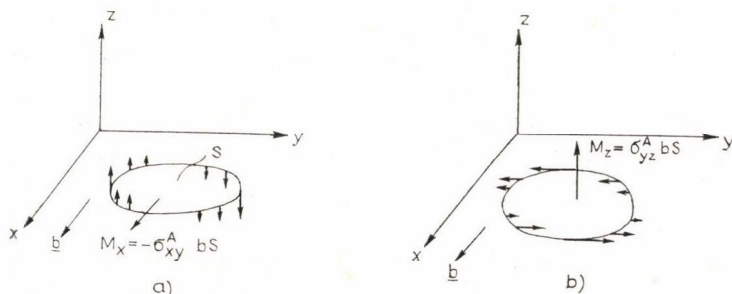
A diszlokációra ható erők és nyomatékok szemléltetéséhez vizsgáljunk meg egy csúszási hurkot, amely az (x, y) síkban fekszik és Burgers vektora x irányú. Tegyük fel először, hogy a csúszási síkban, a csúszás irányában működő feszültséget alkalmazunk, azaz a $\tilde{\sigma}^A$ feszültségtenzor nullától különböző komponense $\sigma_{xz}^A = \sigma_{zx}^A$. Ez a feszültség az elcsúszott területet növelni igyekszik, ami abban nyilvánul meg, hogy az (54) alatti erő a hurok élkomponensein x irányú, a csavarkomponensein pedig y irányú, azaz

$$d\mathbf{f} = \sigma_{xz}^A \cdot b(2 dy, -dx, 0). \quad (60)$$

Ez az erő az élkomponenseken kétszer akkora, mint a Peach—Koehler erő. A hurokra ható forgatónyomaték nulla.

Legyen most a nullától különböző feszültség komponens σ_{xy}^A . Ekkor $(\tilde{\sigma}^A \cdot \mathbf{b}) \cdot d\mathbf{S} \equiv 0$, ami azt jelenti, hogy ez a feszültség az elcsúszott területet nem tudja növelni. Ugyanakkor erőhatások működnek a diszlokáción. (54) második tagja eltűnik, de az első tag $\sigma_{xy}^A \cdot b dx$ nagyságú, z irányú erőt eredményez. Ez azt jelenti, hogy a hurok csavarkomponensein működik a csúszási síkra merőleges erő, amely a diszlokációt mozgatni nem tudja. Ezekből az erőkből egy x (azaz Burgers vektor) irányú forgatónyomaték lép fel (2a. ábra), amely a hurkot a Burgers vektor körül akarja kiforgatni a síkjából olyan helyzetbe, amelyben a működő feszültség a hurkot tágítani tudja.

Hasonló helyzet áll elő σ_{yz}^A feszültség alkalmazásakor. Ebben az esetben $(\tilde{\sigma}^A \mathbf{b}) d\mathbf{S} \equiv 0$ ismét. Most (54) második tagjából származik az y irányban, $\sigma_{yz}^A b dy$ nagyságú erő, amely párhuzamos az élkomponensek többlet atomsíkjával, ezért diszlokációmozgást nem hoz létre (2b. ábra). Forgatónyomaték azonban ismét fellép, amely a hurkot most a felületvektor (z tengely) körül igyekszik elforgatni (a Burgers



2. ábra. Diszlokációhurokra ható forgatónyomaték és az íveleken működő erőhatások

vektorral együtt) olyan helyzetbe, ahol az adott feszültség a hurok területét növelheti.

Alkalmazzuk végül előző eredményeinket diszklínációkra. Ekkor a 2.2. pont szerint $a_l = \varepsilon_{lpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0)$, amivel (52)-ből a diszklínációra ható erő a következő alakban írható fel:

$$f_j^D = \oint_C (\varepsilon_{jkm} \sigma_{lm}^A + \varepsilon_{mlk} \sigma_{jm}^A) \varepsilon_{lpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0) dx'_k + \int_S (\varepsilon_{jpl} \Omega_p \sigma_{lm}^A dS_m + \sigma_{jm}^A \varepsilon_{mlp} \Omega_p dS_l). \quad (61)$$

Az első tag a diszklínáció vonal ívelemeire ható erőt adja meg, míg a második tag a diszklínáció forgástengelyére ható erőt jellemzi [30], amely vektoralakban a következőképpen adható meg:

$$\mathbf{f}^{DS} = \int_S [\boldsymbol{\Omega} \times \tilde{\sigma} dS - \tilde{\sigma} (\boldsymbol{\Omega} \times dS)]. \quad (62)$$

Alkalmazva (58)-at diszklínációkra, belátható, hogy a harmadik tag a (62) tengelyre ható erők nyomatékát adja meg. Az első két tagról ugyanaz mondható el, mint a diszlokációk esetén. Végül megállapíthatjuk, hogy a diszklínációk tulajdonságai általában függenek a vágási felület megválasztásától.

4.3. Zárt felülettel definiált kristályhibák (térfogati hibák)

4.3.1. Homogén térfogati hiba

Legyen az S egy $V \neq 0$ térfogatot határoló zárt felület és definiáljuk a rugalmas pólusokat az S felület mentén az alábbi elmozdulástérrel:

$$a_l(\mathbf{r}') = \begin{cases} -u_l^T(\mathbf{r}'), & \text{ha } \mathbf{r}' \in V, \\ 0, & \text{ha } \mathbf{r}' \notin V. \end{cases} \quad (63)$$

Ez a hiba felel meg a 2.3. pontban bevezetett homogén térfogati hibának. A hiba által okozott elmozdulástérrel (45) felhasználásával és a Gauss-tétel alkalmazásával kifejezhetjük a V térfogatra (a hiba térfogatára, vagy végtelen közeg esetén a mátrix V_m térfogatára) vett integrálokkal:

$$u_n(\mathbf{r}) = - \int_V C_{iklm} u_{l,m}^T G_{ni,k} dV' + \int_V C_{iklm} u_l^T G_{ni,km} dV'. \quad (64)$$

Végtelen közeg esetén a második tagban a Green-függvény deriváltja a (4) egyenletből kifejezhető, amivel az elmozdulástérrel a következő alakban állíthatjuk elő:

$$u_n(\mathbf{r}) = \begin{cases} \int_V \sigma_{ik}^T G_{ni,k'} dV' - u_n^T, & \text{ha } \mathbf{r} \in V, \\ \int_V \sigma_{ik}^T G_{ni,k'} dV', & \text{ha } \mathbf{r} \notin V, \end{cases} \quad (65)$$

ahol $\sigma_{ik}^T = C_{iklm} u_{l,m}^T = C_{iklm} \varepsilon_{lm}^T$. Eredményünk megegyezik az Eshelby által kapottal [30, 7], ha $-\varepsilon_{lm}^T$ -t azonosítjuk a feszültségmentes transzformációval.

A hiba teljes erősségét (44)-ből a Gauss-tétel segítségével a

$$P_{ik} = - \oint_S C_{iklm} u_l^T dS'_m = - \int_V \sigma_{ik}^T dV' \quad (66)$$

alakban állíthatjuk elő. Ennek alapján egy homogén térfogati hiba rugalmas pólusok térfogati eloszlásával jellemezhető, ahol a térfogati pólussűrűség $-\sigma_{ik}^T$. Ezzel és (27) felhasználásával a kölcsönhatási energia:

$$U = - \int_V \sigma_{ik}^T \varepsilon_{ik}^A dV' = - \int_V \sigma_{ik}^A \varepsilon_{ik}^T dV'. \quad (67)$$

A hibára ható erőt (48)-ből, a Gauss-tétellel kaphatjuk meg:

$$f_j = \int_V (\sigma_{lm,j}^A + \sigma_{jm,l}^A) u_{l,m}^T dV', \quad (68)$$

ahol felhasználtuk, hogy $\sigma_{lm,m}^A = 0$.

Látható, hogy a feszültségmentes transzformáció ismeretében a hiba minden tulajdonsága leszámaztatható, előző eredményekkel megegyezésben [7, 30].

4.3.2. Dilatációs centrum tulajdonságai

Példaként alkalmazzuk az előző pontbeli eredményeinket egy, az origóban elhelyezett szimmetrikus dilatációs centrumra (3.4. pont) végtelen közeg esetén. Az ehhez tartozó feszültségmentes transzformáció nyilvánvalóan a következő alakban adható meg:

$$u_{l,m}^T = u_{m,l}^T = -\frac{1}{3} a^T \delta_{lm} \delta(\mathbf{r}'). \quad (69)$$

Most csak (65) második egyenletének van értelme, a mátrix térfogatára vett integrállal, amiből az elmozdulástér az $|\mathbf{r}| \neq 0$ helyeken:

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} a^T C_{iklm} \delta_{lm} G_{ni,k}(\mathbf{r}). \quad (70)$$

Legyen a vizsgált közeg izotrop, ekkor

$$C_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + \mu (\delta_{il} \delta_{km} + \delta_{im} \delta_{kl}), \quad (71)$$

ahol λ és μ a Lamé-féle állandók, és

$$G_{ni} = \frac{1}{8\pi\mu} \left[R_{,kk} \delta_{ni} - \frac{1}{2(1-\nu)} R_{,ni} \right], \quad (72)$$

ahol $R = |\mathbf{r}|$. Ezekkel (70)-ből

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} a^T (3\lambda + 2\mu) G_{ni,i}. \quad (73)$$

Felhasználva, hogy $R_{,kk}=2/R$ és

$$3\lambda + 2\mu = 2\mu \frac{1+\nu}{1-2\nu}, \quad (74)$$

ahol ν a Poisson-szám, végeredményként kapjuk, hogy

$$u_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3} a^T \frac{1+\nu}{4\pi(1-\nu)} \left(\frac{1}{R} \right)_{,n}. \quad (75)$$

Legyen a test teljes térfogatváltozása a dilatációs centrum jelenlétében c , akkor a^T -t a következő feltételből határozhatjuk meg:

$$\int_V u_{n,n} dV = c,$$

amiből (felhasználva, hogy $(1/R)_{,nn} = -4\pi\delta(\mathbf{r})$):

$$a^T = -3 \frac{1-\nu}{1+\nu} c, \quad (76)$$

és így

$$u_n(\mathbf{r}) = -\frac{c}{4\pi} \left(\frac{1}{R} \right)_{,n}. \quad (77)$$

A (66) egyenletből megkaphatjuk a dilatációs centrum póluserősségét is:

$$P_{ik} = - \int_V C_{iklm} \frac{1}{3} a^T \delta_{lm} \delta(\mathbf{r}') dV' = -2\mu \frac{1-\nu}{1-2\nu} c \delta_{ik}. \quad (78)$$

Ezzel a dilatációs centrum minden tulajdonságát meghatároztuk.

A kölcsönhatási energia (67)-ből

$$U = -\frac{1-\nu}{1+\nu} c \sigma_{kk}^A, \quad (79)$$

tehát a dilatációs centrum csak hidrosztatikus feszültségtérrel lép kölcsönhatásba. Az erőhatás (68)-ból

$$f_j = \frac{1-\nu}{1+\nu} c \sigma_{kk,j}^A, \quad (80)$$

mert $\sigma_{jl,l}^A = 0$.

Az izotrop közegre érvényes Hooke törvény és a (77) egyenlet felhasználásával a dilatációs centrum feszültségtere:

$$\sigma_{ik} = c \lambda \delta(\mathbf{r}) \delta_{ik} - \mu \frac{c}{2\pi} \left(\frac{1}{R} \right)_{,ik}. \quad (81)$$

Látható ebből, hogy az origót kivéve, a dilatációs centrum csak tiszta nyírófeszültségeket hoz létre, ezért a klasszikus rugalmasságtanban dilatációs centrumok között nincs kölcsönhatás.

Eredményeink véges méretű, gömbalakú hibára is érvényesek, csak ekkor

$$u_{l,m}^T = u_{m,l}^T = -\frac{1}{3} \varepsilon_{kk}^T \delta_{lm}$$

a hiba térfogatában mindenütt, ahol $-\varepsilon_{kk}^T$ a hiba feszültségmentes transzformációjából származó relatív térfogátváltozás.

4.3.3. Rugalmas inhomogenitás (indukált pólus)

Határoljon most az S felület a vizsgált testben egy olyan $V \neq 0$ térfogatot, amelyben a C_{iklm}^* rugalmas állandók különböznek a mátrix C_{iklm} rugalmas állandóitól és legyen a felület pontjainak elmozdulása nulla, ha egyéb deformációk nincsenek az anyagban. Ha az anyagban $\tilde{\varepsilon}^A$ deformációtér van jelen, akkor a rugalmas állandók ugrása miatt az S felület pólusok forrásává válik, amelyek erőssége az alábbi kifejezéssel adható meg:

$$dP_{ik} = -\Delta C_{iklm} (u_l^A + u_l) dS'_m, \quad (82)$$

ahol $\Delta C_{iklm} = C_{iklm} - C_{iklm}^* \cdot u_l$ egy indukált elmozdulástér, amelynek kialakulása biztosítja a feszültségek folytonosságát az S felület két oldalán, és $u_l = 0$, ha $u_l^A = 0$. Ezt a hibát nevezzük rugalmas inhomogenitásnak. A hiba teljes póluserőssége a következő:

$$P_{ik} = - \int_S \Delta C_{iklm} (u_l^A + u_l) dS'_m = - \int_V \Delta C_{iklm} (\varepsilon_{lm}^A + \varepsilon_{lm}) dV. \quad (83)$$

Összehasonlítva ezt a (66) egyenlettel, látható, hogy a rugalmas inhomogenitás deformációtérre azonosítható egy olyan homogén térfogati hibáéval, amelynek feszültségmentes transzformációját a következő kifejezés definiálja:

$$\tilde{\sigma}_{ik}^T = C_{iklm}^* \tilde{\varepsilon}_{lm}^T = \Delta C_{iklm} (\varepsilon_{lm}^A + \varepsilon_{lm}). \quad (84)$$

Ha a térfogati inhomogenitás alakja alapján az $\tilde{\varepsilon}_{lm}^T$ feszültségmentes transzformációt megadjuk, akkor (65) második egyenletéből ε_{lm} és $\tilde{\varepsilon}_{lm}^T$ kapcsolata elvben megadható. Ezt (84)-be helyettesítve $\tilde{\varepsilon}_{lm}^T$ kifejezhető ε_{lm}^A -val. Pl. gömbalakú inhomogenitás esetén az ekvivalens hibára (76)-ból

$$\varepsilon_{ll} = c = \alpha \tilde{\varepsilon}_{ll}^T, \quad \alpha = \frac{1+\nu}{3(1-\nu)}.$$

Összegezve az indexeket (84)-ben és behelyettesítve (71)-et, valamint ez utóbbi összefüggést, $\tilde{\varepsilon}_{ll}^T$ kifejezhető a következőképpen:

$$\tilde{\varepsilon}_{ll}^T = \frac{K^* - K}{\alpha(K^* - K) - K} \varepsilon_{ll}^A, \quad (85)$$

ahol $K = (\lambda + 2\mu/3)$, a térfogati rugalmassági modulusz. Hasonló módon határozható meg $\tilde{\varepsilon}_{lm}^T$ és ε_{lm}^A deviatorikus komponensei közötti összefüggés is [7, 32]. Az ekvivalens homogén hiba feszültségmentes transzformációját ellipszoid alakú hibára Eshelby határozta meg [32].

Az ekvivalens hiba paraméterének ismeretében a térfogati inhomogenitás tulajdonságai meghatározhatók.

4.3.4. Inhomogén térfogati hiba

Tekintsünk most egy olyan, az S felülettel határolt V térfogatot, amelyben a C_{iklm}^* rugalmas állandók különböznek a mátrixétól, és amelyik eleve tartalmaz pólusokat $\sigma_{ik}^{T*} = C_{iklm}^* \varepsilon_{lm}^{T*}$ sűrűséggel. Egy ilyen hibát nevezünk inhomogén térfogati hibának. A póluserősség egy felületelemen most az előző két hatásból ered, azaz

$$dP_{ik} = -(C_{iklm}^* u_l^{T*} + \Delta C_{iklm} u_l) dS'_m, \quad (86)$$

ahol a zárójel második tagja az indukált elmozdulástértől származik. A hiba teljes erőssége:

$$P_{ik} = - \int_S (C_{iklm}^* u_l^{T*} + \Delta C_{iklm} u_l) dS'_m = - \int_V (\sigma_{ik}^{T*} + \sigma_{ik} - \sigma_{ik}^*) dV'. \quad (87)$$

Látható, hogy ismét definiálható egy ekvivalens homogén térfogati hiba, amelyben a térfogati pólussűrűséget a következő kifejezés adja meg:

$$\bar{\sigma}_{ik}^T = C_{iklm}^* \bar{\varepsilon}_{lm}^T = C_{iklm}^* \varepsilon_{lm}^{T*} + \Delta C_{iklm} \varepsilon_{lm}. \quad (88)$$

Az $\bar{\varepsilon}_{lm}^T$ feszültségmentes transzformáció most is az előző pontban alkalmazott eljárással határozható meg.

5. KRISTÁLYHIBÁK NEMLOKÁLIS RUGALMAS KONTINUUMBAN

5.1. A nemlokális rugalmasságtanról

A klasszikus rugalmasságtanban a szomszédos anyagrészek közötti kölcsönhatási erőket zérus hatótávolságúnak tekintjük. Ez azt jelenti, hogy egy rugalmasan deformált testben kiszemelt térfogatrészről feltételezzük, hogy a környezetével csak a határfelülete mentén lép kölcsönhatásba. Ez a lokális kölcsönhatás más szavakkal megfogalmazható úgy is, hogy egy adott pontban működő feszültségek csak a helyi alakváltozástól függenek és függetlenek a test távolabbi pontjaiban létrejött alakváltozástól.

A zérus hatótávolság feltételezéséhez az adja a fizikai alapot, hogy a szilárd anyagot felépítő atomok (molekulák) között működő erők hatótávolsága atomtávolság nagyságrendű, ami makroszkópikus szinten, első közelítésben nullának tekinthető. A diszkrét atomi modelleken alapuló számítások azonban azt mutatják, hogy az atomi kölcsönhatások véges hatótávolsága jelentősen befolyásolhatja a szilárd anyagok makroszkópikus tulajdonságait is.

Ennek alapján indultak meg próbálkozások a 60-as évek második felében [34, 35] olyan rugalmasságtan kidolgozására, amelyben a feszültségek és deformációk közötti összefüggés a kölcsönhatás nemlokális természetét is tartalmazza. Izotrop anyagok esetén az elmélet ma már részletes kidolgozást nyert [36–38]. A következőkben röviden összefoglaljuk azokat a legfontosabb összefüggéseket az izotrop, lineáris nemlokális kontinuumra vonatkozóan, amelyek a 4. pontban tárgyalt eredmények általánosításához szükségesek.

Tegyük fel, hogy az anyagban létrehozunk $\varepsilon_{lm}(\mathbf{r})$ deformációteret. Akkor a lineáris klasszikus rugalmasságtan szerint minden pontban

$$\sigma_{ik}(\mathbf{r}) = C_{iklm} \varepsilon_{lm}(\mathbf{r}) \quad (89)$$

feszültség jön létre, ahol C_{iklm} a homogén anyag egészére jellemző rugalmas állandókat tartalmazza. A nemlokális kölcsönhatás miatt a valódi $t_{ik}(\mathbf{r})$ feszültség függ a test valamennyi térfogatelemében kialakuló alakváltozástól. Mivel a lokális alakváltozást a (89) alatti feszültség jól jellemzi, ezért a lineáris elmélet keretein belül az \mathbf{r}' hely körüli térfogatelem járulékát az \mathbf{r} pontbeli feszültséghez arányosnak vehetjük $\sigma_{ik}(\mathbf{r}')$ -vel, azaz

$$dt_{ik} = \alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') C_{iklm} \varepsilon_{lm}(\mathbf{r}') dV', \quad (90)$$

ahol $\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ a kölcsönhatás nemlokális természetét leíró, az $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ helyen nem szinguláris, egyelőre ismeretlen függvény. Ezzel az eredő feszültség az \mathbf{r} pontban

$$t_{ik}(\mathbf{r}) = \int_V \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') C_{iklm} \varepsilon_{lm}(\mathbf{r}') dV'. \quad (91)$$

Ha a térfogati erőktől eltekintünk, akkor az egyensúly feltétele a feszültség fizikai jelentése alapján:

$$t_{ik,k} = 0. \quad (92)$$

Mivel (91) szerint az eredő nemlokális feszültséget a klasszikus feszültségekkel állítottuk elő, ezért nyilvánvaló, hogy (92)-vel egyidejűleg a klasszikus feszültségekre vonatkozó egyensúlyi feltételnek is teljesülnie kell, azaz

$$\sigma_{ik,k} = 0. \quad (93)$$

E két egyenlet egyidejű teljesülése azt jelenti, hogy egy adott problémához tartozó deformációteret ugyanannak vesszük a klasszikus és a nemlokális esetben és csak a megfelelő feszültségeket definiáljuk különbözőképpen, a (83), illetve (91) egyenlet szerint. Ez a megállapítás nagyon lényeges, mert ez azt jelenti, hogy a klasszikus rugalmasságtanban már megoldott feladatokhoz tartozó deformációterek változatlanul felhasználhatók a nemlokális feszültségek meghatározására.

Nyilvánvaló, hogy a (91) alatti nemlokális feszültségek határesetként magukban foglalják a klasszikus esetet is. A lokális kölcsönhatás a Dirac δ függvénnyel jellemezhető, azaz ekkor $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, amivel (91)-ből a (89) összefüggés adódik. A δ függvény tulajdonságának analógiájára az általános esetre vonatkozó α függvényre is előírjuk a következő összefüggés teljesülését:

$$\int_V \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' = 1. \quad (94)$$

Ez fizikailag azt jelenti, hogy homogén alakváltozások esetén a klasszikus és nemlokális feszültségek egymással megegyeznek.

5.2. Kristályhibák tulajdonságai

Az előző pontok alapján látható, hogy a kristályhibák tulajdonságainak kontinuummechanikai leírásakor a valódi térfogati erők hatása elhanyagolható. Ezért egy-egy speciális hiba esetén a (92) alatti egyensúlyi feltételt kell megoldanunk. Ilyen számítást végzett Eringen csavar-, illetve éldiszlokációra [39, 40].

A kristályhibák rugalmas pólusok eloszlásával történő leírásához a 3.3. pontban bevezettünk fiktív térfogati erőket, amelyek jól felhasználhatók a hibák általános tu-

lajdonságainak meghatározásához. A következőkben megadjuk ezeknek a fiktív térfogati erőknek az általánosítását a nemlokális rugalmasságtanra is. Az általánosítás alapját az képezi, hogy az előző pontban vázolt kapcsolat a klasszikus és nemlokális rugalmasságtan között változatlan maradjon ezen erők bevezetése után is.

Az egyszerűség kedvéért csak monopólusokkal foglalkozunk. Legyen az

$$F_i = -P_{ik}\delta_{,k} \quad (95)$$

erő nemlokális megfelelője F_i^N . E térfogati erőt úgy kell meghatároznunk, hogy a

$$t_{ik,k} + F_i^N = 0 \quad (96)$$

egyensúlyi feltétel megoldása ugyanarra az elmozdulástérre (deformációtérre) vezessen, mint amit a

$$\sigma_{ik,k} + F_i = 0 \quad (97)$$

klasszikus egyenlet megoldása eredményez. Ezen egyenlet megoldása kifejezhető a Green-függvény segítségével az alábbi alakban (lásd (3) egyenletet):

$$u_i(\mathbf{r}') = \int_V F_j(\mathbf{r}'') G_{ij}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') dV'', \quad (98)$$

ahol G_{ij} kielégíti a (4) egyenletet. Behelyettesítve ezt a kifejezést (91)-be, kapjuk, hogy

$$t_{ik}(\mathbf{r}) = \int_V \int_V C_{iklm} \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_j(\mathbf{r}'') G_{lj,m'}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') dV' dV''. \quad (99)$$

Ezt felhasználva (96)-ból kifejezhetjük a nemlokális térfogati erőt:

$$F_i^N(\mathbf{r}) = -t_{ik,k} = -\int_V \int_V C_{iklm} \alpha_{,k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_j(\mathbf{r}'') G_{lj,m'}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') dV' dV''. \quad (100)$$

Alkalmazva az $\alpha_{,k} = -\alpha_{,k'}$ azonosságot és az x'_k változó szerinti parciális integrálást, a következő kifejezésre jutunk:

$$F_i^N(\mathbf{r}) = -\int_V \int_V C_{iklm} \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_j(\mathbf{r}'') G_{lj,m'k'}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') dV' dV''. \quad (101)$$

A (4) egyenlet felhasználásával

$$F_i^N(\mathbf{r}) = \int_V \int_V \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_j(\mathbf{r}'') \delta_{ij} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') dV' dV'', \quad (102)$$

vagy elvégezve az \mathbf{r}'' szerinti integrálást:

$$F_i^N(\mathbf{r}) = \int_V \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') F_i(\mathbf{r}') dV'. \quad (103)$$

Eredményünk kapcsolatot ad azon térfogati erők között, amelyek ugyanolyan elmozdulástérre vezetnek a lokális és nemlokális rugalmas közegben.

Behelyettesítve (103)-ba a monopólusra vonatkozó (95) lokális erőt és felhasználva a Dirac δ tulajdonságát, a megfelelő nemlokális térfogati erőre a következő kifejezést kapjuk:

$$F_i^N(\mathbf{r}) = P_{ik}(\mathbf{r}') \alpha_{,k'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (104)$$

Mivel az α függvény a nemlokális esetben nem szinguláris, ezért a monopólust jellemző térfogati erő sem szinguláris.

5.3. Kölcsönhatás dilatációs centrumok között

A (104) kifejezés felhasználásával leszámaztathatók a 3.4. pont monopólusra vonatkozó eredményei, majd a (42) alatti definícióval a kristályhibákkal kapcsolatos, a 4. pontban levezetett eredmények nemlokálisan rugalmas közeg esetén. A számítások azt mutatják [9], hogy valamennyi eredmény alakilag változatlan marad, csak a σ_{ik} feszültségek helyett mindenütt t_{ik} jelenik meg.

Egy egyszerű alkalmazásként vizsgáljuk meg a nemlokális közegben levő dilatációs centrumok kölcsönhatását. Legyen egy c^A erősségű dilatációs centrum az \mathbf{r}' helyen, akkor az \mathbf{r}'' helyen fellépő klasszikus feszültségeket (81)-ből kaphatjuk meg az $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' - \mathbf{r}''$, illetve $R = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|$ helyettesítéssel. (81)-et (91)-be behelyettesítve megkapjuk a nemlokális feszültségteret, azaz

$$t_{ik}^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = c^A \lambda \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{ik} - \mu \frac{c^A}{2\pi} \int_V \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') \left(\frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} \right)_{,ik} dV''. \quad (105)$$

Az indexek összejtésével és (74) felhasználásával:

$$t_{ii}^A(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 2\mu c^A \frac{1+\nu}{1-2\nu} \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (106)$$

Behelyettesítve ezt (79)-be σ_{kk}^A helyett, megkapjuk a kölcsönhatási energiát az \mathbf{r} helyen levő c erősségű, illetve az \mathbf{r}' helyen levő c^A erősségű dilatációs centrum között:

$$U(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -2\mu \frac{1-\nu}{1-2\nu} c \cdot c^A \alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (107)$$

Ebből ismét látszik, hogy a klasszikus esetben, amikor $\alpha(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, akkor dilatációs centrumok között nincs kölcsönhatás.

A nemlokális esetre vonatkozó kölcsönhatás vizsgálatához az α függvényt meg kell adnunk. *Eringen* nyomán [39, 40] jellemezzük a nemlokális kölcsönhatást az alábbi, a (94) feltételt kielégítő függvénnyel:

$$\alpha = \frac{k^3}{\pi^{3/2} a^3} e^{-k^2 \frac{R^2}{a^2}}, \quad (108)$$

ahol $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, a hibák távolsága, a a vizsgált anyag rácsparamétere, k pedig egy állandó, amelynek értékét felületcentrált köbös (fck) fémekre a következőképpen határozhatjuk meg.

Ha a szubsztitúciós oldott atomokat dilatációs centrumnak tekintjük, akkor ezek erőssége a

$$c = \frac{a}{4} \varepsilon \quad (109)$$

kifejezéssel jellemezhető, ahol $\varepsilon = (v - v_0)/v$, az oldott atomok által okozott relatív térfogatváltozás. Ezzel és a $\nu \cong 1/3$ értékkel (107) a következő lesz:

$$U(R) = 0,0449 \mu k^3 a^3 \varepsilon \varepsilon^A e^{-k^2 \frac{R^2}{a^2}}. \quad (110)$$

Nyilvánvaló, hogy az elmélet linearitása miatt ebből definiálható a hiba sajátenergiája a következőképpen:

$$U_s = \frac{1}{2} U(0) = 0,0225 \mu k^3 a^3 \varepsilon^2. \quad (111)$$

Eredményünk felhasználható a k értékének becslésére, ha összehasonlítjuk a Flinn és Maradudin által diszkrét atomi modell alapján számítottal, amely a következő [41]:

$$U_s = 0,06 \mu a^3 \varepsilon^2. \quad (112)$$

Az összehasonlítás alapján $k \cong 1,40 \cong \sqrt{2}$, amivel $a/k = a/\sqrt{2}$, éppen az első szomszéd távolság. Ez az érték valamivel nagyobb az Eringen által becsülténél [39].

k értékének ismeretében az fcc fémekben oldott atomok kölcsönhatási energiája (110)-ból:

$$U(R) = 1,33 \varepsilon \varepsilon^A e^{-2 \frac{R^2}{a^2}} \text{ (eV)}. \quad (113)$$

Pl. alumíniumban Si atomokra $\varepsilon = -0,16$ és Mg atomokra $\varepsilon^A = 0,41$ [42], amivel első szomszéd távolságban ($R = a/\sqrt{2}$) $U = 0,024$ eV. Ez az érték azt mutatja, hogy a rugalmas kölcsönhatás szennyező (ötvöző) atompárok kialakulását csak viszonylag alacsony hőmérsékleten eredményezheti.

5.4. Éldiszlokáció és dilatációs centrum kölcsönhatása

Eringen számításai alapján [40] egy éldiszlokáció nemlokális hidrosztatikus feszültségtére végtelen közeg esetén:

$$t_{ii} = \mu b \frac{1+\nu}{\pi(1-\nu)} \frac{k}{a\varrho} (1-e^{-\varrho^2}) \sin \Theta, \quad (114)$$

ahol $\varrho = kr/a$, r és Θ a diszlokációra merőleges síkbani polárkoordináták. (79) és (114) felhasználásával az éldiszlokáció és a dilatációs centrum közötti kölcsönhatási energia:

$$U(r, \Theta) = U_0 \frac{1-e^{-\varrho^2}}{\varrho} \sin \Theta, \quad (115)$$

ahol $U_0 = \mu b k c / \pi a$. Eredményünk szerint a kölcsönhatási energia véges marad — szemben a klasszikus esettel —, ha $r \rightarrow 0$. Ha $a \rightarrow 0$, akkor (115) a klasszikus Cottrell—Bilby eredményt [43] adja.

(80) és (114) alapján definiálhatjuk a dilatációs centrumra r irányban ható erőt:

$$f_r = -\frac{\partial U}{\partial r} = -f_0 \frac{(1+2\varrho^2)e^{-\varrho^2}-1}{\varrho^2} \sin \Theta, \quad (116)$$

ahol $f_0 = kU_0/a$.

A kölcsönhatási erő vonzó, ha $c > 0$, $\sin \Theta < 0$ (dilatált zóna), vagy $c < 0$, $\sin \Theta > 0$ (komprimált zóna). A diszlokáció közelében a dilatációs centrum (oldott atom) kötött állapotban lehet a $\varrho = 1,121$ ($R = 1,121 a/k$) távolságban.

A maximális vonzóerő pedig $\varrho = 1,793$ helyen lép fel.

Fek fémekben a maximális kötési energia ($\sin \Theta = 1$):

$$U_{\max} = 0,638 U_0 = 0,05 \mu a^3 \varepsilon. \quad (117)$$

Alumínium esetén $U_{\max} = 0,54 \varepsilon$ (eV), ami Mg, illetve Si oldott atomokra 0,22, illetve 0,09 eV-ot ad.

Összefoglalásul megállapíthatjuk, hogy a nemlokális rugalmasságtan olyan feladatok megoldásánál is eredményesen alkalmazható, amelyekre a klasszikus esetben a kölcsönhatás lokális természete miatt helytelen eredmény (a kölcsönhatás hiánya dilatációs centrumoknál, végtelen kölcsönhatás a diszlokáció üregénél stb.) adódik.

6. KRISTÁLYHIBÁK MIKROPOLÁROS ANYAGOKBAN

6.1. Bevezetés

A klasszikus kontinuum mechanika egy lehetséges általánosítása, amelyet az utóbbi években dolgoztak ki, a poláros kontinuumok mechanikája. Ezek között legfontosabb és legegyszerűbb a mikropoláros anyagok leírására alkalmas kontinuum elmélet [44–46]. Ezen elmélet feltételezi, hogy a rugalmas közeg bármely térfogatelemére a térfogati erőkhöz kívül térfogati nyomaték is hathat, valamint az egyes térfogatelemek lokális elfordulása feszültségnyomatékot ébreszt. Az I_i térfogati nyomaték és az m_{ik} feszültségnyomaték fellépése a σ_{ik} feszültségtenzorban antiszimmetrikus rész megjelenését eredményezi. A nyomatékot létrehozó mennyiségek hatása a deformációban úgy jelentkezik, hogy az \mathbf{u} elmozdulás tér mellett bevezetjük a $\boldsymbol{\varphi}$ mikroforgásteret is.

A mikropoláros anyagok is tartalmazhatnak kristályhibákat, amelyek szerkezete az új szabadságfokok megjelenése miatt lényegesen bonyolultabbá válik [45, 47]. Az előző pontokban láttuk, hogy a klasszikus rugalmas anyagokban előforduló hibák egységesen tárgyalhatók a rugalmas szingularitások bevezetésével. Ez a leírási mód általánosítható volt a nem-lokális anyagok hibaszerkezetének jellemzésére is. A következőkben ezen elmélet további kiterjesztését mutatjuk be, amelynek alapján a mikropoláros anyagokban levő hibák tulajdonságai is meghatározhatók.

6.2. A mikropoláros rugalmasságtan alapegyenletei

Egyensúlyban a mikropoláros kontinuumot a következő egyenletekkel jellemezhetjük [44]:

$$\sigma_{ik,i} + f_k = 0, \quad (118a)$$

$$m_{ik,i} + \varepsilon_{kmn} \sigma_{mn} + I_k = 0, \quad (118b)$$

ahol σ_{ik} és m_{ik} a feszültség és feszültségnyomaték tenzor, f_k és I_k a tömegerő és tömegnyomaték.

A deformációk jellemzésére az alábbi tenzorokat vezetjük be [44]:

$$\gamma_{ml} = u_{l,m} + \varepsilon_{lmn} \varphi_n, \quad (119a)$$

$$\chi_{ml} = \varphi_{l,m}. \quad (119b)$$

A feszültségek és deformációk közötti kapcsolatot a következő anyagegyenletekkel definiáljuk:

$$\sigma_{ik} = C_{iklm} \gamma_{ml} = C_{iklm} u_{l,m} - 2\alpha \varepsilon_{ikm} \varphi_m, \quad (120)$$

$$m_{ik} = D_{iklm} \kappa_{ml} = D_{iklm} \varphi_{l,m}, \quad (121)$$

ahol

$$C_{iklm} = \lambda \delta_{ik} \delta_{lm} + (\mu - \alpha) \delta_{il} \delta_{km} + (\mu + \alpha) \delta_{im} \delta_{kl}, \quad (122)$$

$$D_{iklm} = \beta \delta_{ik} \delta_{lm} + (\gamma - \varepsilon) \delta_{il} \delta_{km} + (\gamma + \varepsilon) \delta_{im} \delta_{kl}. \quad (123)$$

Itt λ és μ a Lamé állandókat, míg α , β , γ , ε a megfelelő mikropoláros rugalmassági állandókat jelöli. A (120), (121) egyenleteket (118), (119)-be helyettesítve megkapjuk az egyensúlyban levő mikropoláros anyag rugalmas állapotát leíró téregyenleteket:

$$C_{iklm} u_{l,mi} - 2\alpha \varepsilon_{ikm} \varphi_{m,i} + f_k = 0, \quad (124)$$

$$D_{iklm} \varphi_{l,mi} + 2\alpha \varepsilon_{ikm} u_{n,m} - 4\alpha \varphi_k + l_k = 0. \quad (125)$$

Ezen egyenletek megoldását végtelen közeg esetén négy Green-függvény segítségével a következő módon állíthatjuk elő:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int_V f_j(\mathbf{r}') G_{lj}^F(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' + \int_V l_j(\mathbf{r}') G_{lj}^L(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV', \quad (126)$$

$$\varphi_l(\mathbf{r}) = \int_V f_j(\mathbf{r}') g_{lj}^F(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV' + \int_V l_j(\mathbf{r}') g_{lj}^L(\mathbf{r} - \mathbf{r}') dV'. \quad (127)$$

A Green-függvények az alábbi egyenletrendszerből határozhatók meg:

$$C_{iklm} G_{lj,mi}^F - 2\alpha \varepsilon_{ikm} g_{mj,i}^F + \delta_{kj} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0, \quad (128)$$

$$C_{iklm} G_{lj,mi}^L - 2\alpha \varepsilon_{ikm} g_{mj,i}^L = 0, \quad (129)$$

$$D_{iklm} g_{lj,mi}^F + 2\alpha \varepsilon_{ikm} G_{mj,n}^F - 4\alpha g_{kj}^F = 0, \quad (130)$$

$$D_{iklm} g_{lj,mi}^L + 2\alpha \varepsilon_{ikm} G_{mj,n}^L - 4\alpha g_{kj}^L + \delta_{kj} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0, \quad (131)$$

és kielégítik a következő szimmetria relációkat [48]:

$$G_{lj}^L(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_{lj}^F(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (132)$$

$$G_{lj}^F = G_{jl}^F, \quad g_{lj}^L = g_{jl}^L, \quad g_{lj}^F = -g_{jl}^F. \quad (133)$$

6.3. Kristályhibák modelljei mikropoláros anyag esetén

6.3.1. Vonalmenti hibák

Általános vonalmenti hibát mikropoláros anyagban is a 2. pontban leírt módon készíthetünk (1. ábra). Az anyagban kijelölünk egy S felületet, amely a C görbére illeszkedik. A felület mentén az anyagot felhasítjuk és az így kapott felületeket egymáshoz képest merevtestszerűen az

$$a_k = b_k + \varepsilon_{kpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0) \quad (134)$$

vektorral elmozdítjuk. A deformációnál keletkezett üregek kitöltése után egyesítjük az anyagot az S felület mentén. Az így kapott hiba deformációs tereit a következő módon határozhatjuk meg. Az $u_i(\mathbf{r})$ elmozdulás-tér meghatározásához a (128) egyenletet megszorozzuk az $u_k(\mathbf{r})$ elmozdulás vektorral, a (130) egyenletet a $\varphi_k(\mathbf{r})$ elforgás vektorral, majd kivonva (128)-ból (130)-at, az \mathbf{r}' változó szerint integrálunk az egész térre, úgy hogy az S felületet egy S' zárt felülettel kirekesztjük az integrálási tartományból. Az így kapott egyenletre többször alkalmazzuk a Gauss-tételt, majd elvégezve az $S' \rightarrow S$ határátmenetet, kihasználjuk, hogy a σ_{ij} és m_{ij} feszültségek folytonosan mennek át az S felületen. Ekkor a következő kifejezéshez jutunk:

$$u_j(\mathbf{r}) = - \int_S [C_{iklm} G_{lj, m'}^F a_k(\mathbf{r}') + 2\alpha \varepsilon_{ikm} g_{mj}^F a_k(\mathbf{r}') - D_{iklm} g_{lj, m'}^F \Omega_k(\mathbf{r}')] dS'_i. \quad (135)$$

Az így nyert formulában a_k és Ω_k az u_k és φ_k elmozdulás terek határértékei a vágási felület két oldalán, azaz

$$u_k|_{S^+} - u_k|_{S^-} = a_k = b_k + \varepsilon_{kpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0),$$

és

$$\varphi_k|_{S^+} - \varphi_k|_{S^-} = \Omega_k.$$

Teljesen hasonló módon meghatározhatjuk a mikroforgás teret a (129) és (131) egyenletek felhasználásával:

$$\varphi_j(\mathbf{r}) = - \int_S [D_{iklm} g_{lj, m'}^L \Omega_k(\mathbf{r}') - 2\alpha \varepsilon_{ikm} g_{mj}^L a_k(\mathbf{r}') - C_{iklm} G_{lj}^L a_k(\mathbf{r}')] dS'_i. \quad (136)$$

6.3.2. Homogén térfogati hibák

Homogén térfogati hibák deformációs tereinek meghatározásához a 4.3. pontban alkalmazott módszert általánosíthatjuk.

Hozzuk létre az erő és nyomatékmentes mátrixban az S felület által határolt V térfogatú üregben a térfogati hibát. A V térfogatba nem illeszkedő anyagdarabot a

$$\sigma_{ik}^T = C_{iklm} \gamma_{ml}^T \quad \text{és} \quad m_{ik}^T = D_{iklm} \kappa_{ml}^T \quad (137)$$

feszültségekkel transzformáljuk az üreg méretére. Itt

$$\gamma_{ml}^T = u_{l, m}^T + \varepsilon_{lmn} \varphi_n^T \quad \text{és} \quad \kappa_{ml}^T = \varphi_{l, m}^T \quad (138)$$

mennyiségeket jelöli. Az így deformált anyagot az üregbe helyezzük és relaxáltatjuk. Ekkor az S felület mentén a

$$df_k = \sigma_{ik}^T dS_i, \quad dl_k = m_{ik}^T dS_i$$

erő és nyomaték kezd működni. Ezen mennyiségeket (126)-ba helyettesítve megkapjuk a hibán kívüli elmozdulás teret:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int_S [C_{ijnm} u_{n, m'}^T G_{lj}^F - 2\alpha \varepsilon_{ijm} \varphi_m^T G_{lj}^F + D_{ijnm} \varphi_{n, m'}^T G_{lj}^L] dS'_i. \quad (139)$$

Ebből a Gauss-tétel segítségével a következő kifejezést kapjuk:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int_V [C_{ijmn} u_{n,m'}^T G_{lj,i'}^F - 2\alpha \varepsilon_{ijm} \varphi_m^T G_{lj,i'}^F + C_{ijmn} u_{n,m'}^T G_{lj,i'}^F - \\ - 2\alpha \varepsilon_{ijm} \varphi_m^T G_{lj,i'}^F + D_{ijnm} \varphi_{n,m'}^T G_{lj,i'}^L + D_{ijnm} \varphi_{n,m'}^T G_{lj,i'}^L] dV'. \quad (140)$$

A továbbiakban felhasználjuk a (118a)–(121) és a (129) egyenleteket, amivel az elmozdulás tér a következő végső alakra hozható:

$$u_l(\mathbf{r}) = \int_V [\sigma_{ij}^T G_{lj,i'}^F + m_{ij}^T G_{lj,i'}^L - \varepsilon_{jmn} \sigma_{mn}^T G_{lj,i'}^L] dV'. \quad (141)$$

Hasonló módszerrel a mikroforgás térre a

$$\varphi_l(\mathbf{r}) = \int_V [\sigma_{ij}^T g_{lj,i'}^F + m_{ij}^T g_{lj,i'}^L - \varepsilon_{jmn} \sigma_{mn}^T g_{lj,i'}^L] dV' \quad (142)$$

kifejezés adódik. Látható, ha $m_{ik}=0$ és $\sigma_{ik}=\sigma_{ki}$, azaz kizárjuk a poláros effektusokat, ekkor (141) a klasszikus eredményeket szolgáltatja.

6.4. Pólusokra vonatkozó általános megfontolások

6.4.1. A mikropoláros pólusok definíciója [10]

Működnek a mátrixban az \mathbf{r}' helyen f_j ponterő és l_j pontnyomaték. Ekkor az általuk keltett elmozdulások (126) és (127)-ből kaphatók meg:

$$u_l = f_j G_{lj}^F + l_j G_{lj}^L, \quad (143)$$

$$\varphi_l = f_j g_{lj}^F + l_j g_{lj}^L. \quad (144)$$

Tételezzük fel, hogy az \mathbf{r}' hely kis környezetében N_1 ponterő és N_2 pontnyomaték működik, akkor az elmozdulás tér a következő lesz

$$u_l = \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha G_{lj}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{d}^\alpha) + \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta G_{lj}^L(\mathbf{r}, \mathbf{r}' + \mathbf{d}^\beta).$$

A ponterők az $\mathbf{r}' + \mathbf{d}^\alpha$, a pontnyomatékok az $\mathbf{r}' + \mathbf{d}^\beta$ helyeken hatnak. Mivel a \mathbf{d}^α , \mathbf{d}^β vektorok kicsik, ezért az elmozdulás teret Taylor-sorba fejthetjük az \mathbf{r}' változó környezetében:

$$u_l(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha G_{lj}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha d_m^\alpha G_{lj,m'}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha d_m^\alpha d_n^\alpha G_{lj,m'n'}^F(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \dots + \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta G_{lj}^L(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \\ + \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta d_m^\beta G_{lj,m'}^L + \frac{1}{2} \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta d_m^\beta d_n^\beta G_{lj,m'n'}^L + \dots \quad (145)$$

A sorfejtés nem eltűnő tagjai jellemzik a különböző rendű pólusokat, hasonlóan mint a klasszikus anyagban (3.1. pont). Belátható, hogy egyensúlyban egy fizikailag lehet-

séges hibát felépítő ponterő és pontnyomaték rendszernek a következő összefüggéseket kell kielégíteni:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha(\mathbf{r}') = 0, \quad (146)$$

$$\sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta(\mathbf{r}') + \sum_{\alpha=1}^{N_1} \varepsilon_{jmn} f_n^\alpha d_m^\alpha = 0, \quad (147)$$

azaz a pólust felépítő ponterők eredője zérus, és az erők nyomatéka egyensúlyt tart a pontnyomatékokkal. A fizikailag legegyszerűbb mikropoláros hibát (rugalmas szingularitást) a következő tenzor definiálja:

$$P_{jm}^F = \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha d_m^\alpha, \quad (148)$$

$$P_{jm}^L = \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta d_m^\beta. \quad (149)$$

Az ilyen hibákat, mint később látni fogjuk, most is monopólusnak nevezhetjük, mivel bizonyos esetekben más terekkel való kölcsönhatásakor nem hat rá forgatónyomaték. A p rendű mikropoláros pólust a következő tenzorokkal jellemezhetjük:

$$P_{jm_1 \dots m_{p-1}}^F = \sum_{\alpha=1}^{N_1} f_j^\alpha d_{m_1}^\alpha \dots d_{m_{p-1}}^\alpha, \quad (150)$$

$$P_{jm_1 \dots m_{p-1}}^L = \sum_{\beta=1}^{N_2} l_j^\beta d_{m_1}^\beta \dots d_{m_{p-1}}^\beta. \quad (151)$$

Megjegyezzük, hogy (147) miatt a P_{jm}^F , P_{jm}^L tenzorok nem szimmetrikusak.

A (146), (147) feltételek és az előző definíciók, valamint a 3.2. pont alapján megadható egy p rendű pólus elmozdulás tere és hasonló sorfejtés után az elfordulás tere is az alábbi alakban:

$$u_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{(p-1)!} [G_{lj, s' m'_1 \dots m'_{p-1}}^F P_{jsm_1 \dots m_{p-1}}^F + G_{lj, s' m'_1 \dots m'_{p-1}}^L P_{jsm_1 \dots m_{p-1}}^L] - \varepsilon_{jsn} \delta_{1p} G_{lj}^L P_{ns}^F, \quad (152)$$

$$\varphi_l(\mathbf{r}) = \frac{1}{(p-1)!} [g_{lj, s' m'_1 \dots m'_{p-1}}^F P_{jsm_1 \dots m_{p-1}}^F + g_{lj, s' m'_1 \dots m'_{p-1}}^L P_{jsm_1 \dots m_{p-1}}^L] - \varepsilon_{jsn} \delta_{1p} g_{lj}^L P_{ns}^F, \quad (153)$$

ahol az utolsó tagok csak az elsőrendű pólus ($p=1$) esetén különböznek nullától.

6.4.2. A mikropoláros pólust helyettesítő térfogati erő és nyomaték

Behelyettesítve a p rendű pólus elmozdulás terét, a (124) egyensúlyi egyenletbe, kapjuk, hogy

$$C_{iklm} u_{l, m_i}^P - 2\alpha \varepsilon_{ikm} \varphi_{m, i}^P + F_k^P = 0. \quad (154)$$

Ebből definiálhatjuk a pólust helyettesítő térfogati erőt, amely a (128), (129) Green-függvény egyenletek felhasználásával a következő alakú lesz:

$$F_k^P = \frac{(-1)^P}{(p-1)!} P_{ks m_1 m_2 \dots m_{p-1}}^F \delta_{, sm_1 m_2 \dots m_{p-1}} (\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (155)$$

Hasonlóan a (125), (131) és (132) egyenletek felhasználásával a helyettesítő térfogati nyomatékra a

$$L_k^P = \frac{(-1)^P}{(p-1)!} P_{ks m_1 \dots m_{p-1}}^L \delta_{, sm_1 \dots m_{p-1}} (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \delta_{1p} \varepsilon_{ksn} P_{ns}^F \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (156)$$

kifejezés adódik.

A későbbi felhasználás miatt érdemes a $p=1$ esetre adódó eredményeket a (155), (156) kifejezésekből külön felírni:

$$F_k = -P_{ks}^F \delta_{, s} (\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (157)$$

$$L_k = -P_{ks}^L \delta_{, s} (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - \varepsilon_{ksn} P_{ns}^F \delta (\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (158)$$

6.4.3. Pólusok kölcsönhatása más deformációterekkel

Egy \mathbf{r} helyen levő p -ed rendű pólust $\gamma_{ik}^A, \varphi_{k,i}^A$ tenzorokkal jellemzett külső deformációs térbe helyezve, a sajátenergiáján kívül kölcsönhatási energia is megjelenik, amely a következőképpen adható meg [44]:

$$U(\mathbf{r}) = \int_{V'} [\sigma_{ik}^P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \gamma_{ik}^A(\mathbf{r}') + m_{ik}^P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_{i,k}^A(\mathbf{r}')] dV'. \quad (159)$$

A kölcsönhatási energia meghatározásához ismét alkalmazhatjuk a 3.4. pontban követett gondolatmenetet, felhasználva, hogy a test határfelülete mentén most

$$\sigma_{ik}^P n_i|_S = 0, \quad \text{és} \quad m_{ik}^P n_i|_S = 0. \quad (160)$$

A (118a, b), valamint a (155), (156) egyenletek felhasználásával a következő végeredményre jutunk:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{1}{(p-1)!} [P_{ks m_1 \dots m_{p-1}}^F u_{k, sm_1 \dots m_{p-1}}^A + P_{ks m_1 \dots m_{p-1}}^L \varphi_{k, sm_1 \dots m_{p-1}}^A] - \delta_{1p} \varepsilon_{ksn} P_{ns}^F \varphi_k^A. \quad (161)$$

Ebből a kölcsönhatási energia monopólus esetén:

$$U = P_{jm}^F (u_{j,m}^A + \varepsilon_{jms} \varphi_s^A) + P_{jm}^L \varphi_{j,m}^A = P_{jm}^F \gamma_{mj}^A + P_{jm}^L \varkappa_{mj}^A. \quad (162)$$

A (28) összefüggés alapján vezessük be ismét a pólus által okozott torzulásokat jellemző tenzorokat a következő definíciók alapján:

$$P_{jm}^F = C_{ikjm} a_{ki}^F, \quad (163)$$

$$P_{jm}^L = D_{ikjm} a_{ki}^L. \quad (164)$$

Behelyettesítve ezeket (162)-be és felhasználva a (120), (121) összefüggéseket, a kölcsönhatási energia a következő alakban is felírható:

$$U = \sigma_{ik}^A a_{ki}^F + m_{ik}^A a_{ki}^L. \quad (165)$$

Ezt felhasználva meghatározhatjuk a pólusra ható forgatónyomatékokot. A 3.4. pontban alkalmazott gondolatmenet megismétlésével a következő eredményre jutunk:

$$M_n = \varepsilon_{nij} (\sigma_{ik}^A a_{kj}^F + \sigma_{ki}^A a_{jk}^F + m_{ik}^A a_{kj}^L + m_{ki}^A a_{jk}^L). \quad (166)$$

6.5. Kristályhibák leírása felületi pólus eloszlással

Ebben a fejezetben megmutatjuk, hogy a 6.3. pontban ismertetett hibák most is egységesen tárgyalhatók, megfelelően választott felületi póluseloszlás segítségével.

6.5.1. Általános összefüggések

Végtelen mikropoláros kontinuumban kiválasztott S felület \mathbf{r}' helyvektorral jellemzett pontjához tartozó dS' felületelemét toljuk el $\mathbf{a}(\mathbf{r}')$ -vel és forgassuk el $\mathbf{\Omega}(\mathbf{r}')$ -vel. Az így létrehozott szingularitásokat a

$$dP_{lm}^F = -C_{iklm} a_k(\mathbf{r}') dS'_i, \quad (167)$$

$$dP_{lm}^L = -D_{iklm} \Omega_k(\mathbf{r}') dS'_i \quad (168)$$

rugalmas pólusokkal jellemezzük. Ilyen pólus eloszlás esetén a (152), (153) kifejezések a következő elmozdulástereket adják:

$$u_j(\mathbf{r}) = - \int_{S'} [C_{iklm} G_{lj, m'}^F a_k + D_{iklm} G_{lj, m'}^L \Omega_k - \varepsilon_{lmn} C_{iknm} G_{lj}^L a_k] dS'_i, \quad (169)$$

$$\varphi_j(\mathbf{r}) = - \int_{S'} [C_{iklm} g_{lj, m'}^F a_k + D_{iklm} g_{lj, m'}^L \Omega_k - \varepsilon_{lmn} C_{iknm} g_{lj}^L a_k] dS'_i. \quad (170)$$

A pólus eloszlás kölcsönhatási energiáját a (165) egyenlet szolgáltatja:

$$U = - \int_{S'} [C_{iklm} a_k(\mathbf{r}') \gamma_{ml}^A + D_{iklm} \Omega_k(\mathbf{r}') \varphi_{l, m}^A] dS'_i = - \int_{S'} [\sigma_{ik}^A a_k(\mathbf{r}') + m_{ik}^A \Omega_k(\mathbf{r}')] dS'_i. \quad (171)$$

A 6.4.1. pontban megadott meggondoláshoz hasonlóan megadhatjuk a pólus-eloszlásra ható erőt. Ez most is két részből tevődik össze, egyik összetevőt a (171) energia kifejezéstől kapjuk gradiens képzéssel, míg a másik a hiba keletkezésével kapcsolatos. Ezt figyelembe véve az eredő erő:

$$f_n = \int_{S'} [\sigma_{ik, n}^A a_k(\mathbf{r}') + m_{ik, n}^A \Omega_k(\mathbf{r}') + \sigma_{in, j}^A a_j(\mathbf{r}') + m_{in, j}^A \Omega_j(\mathbf{r}')] dS'_i. \quad (172)$$

A (166) kifejezésből az

$$a_{kj}^F = -a_k(\mathbf{r}') dS_j \quad \text{és} \quad a_{kj}^L = -\Omega_k(\mathbf{r}') dS_j \quad (173)$$

összefüggések felhasználásával a póluseloszlásra ható forgatónyomatékokat is könnyen megkaphatjuk:

$$M_n = -\varepsilon_{nij} \left\{ \int_{S'} (\sigma_{ik}^A a_k + m_{ik}^A \Omega_k) dS'_j + \int_{S'} (\sigma_{ki}^A a_j + m_{ki}^A \Omega_j) dS'_k \right\}. \quad (174)$$

A (174) kifejezést megadjuk vektoros formában is a következőképpen:

$$\mathbf{M} = \int_{S'} \{ \mathbf{a} \times (\tilde{\sigma}^A d\mathbf{S}) + d\mathbf{S} \times (\mathbf{a} \tilde{\sigma}^A) + \boldsymbol{\Omega} \times (\tilde{m}^A d\mathbf{S}) + d\mathbf{S} \times (\boldsymbol{\Omega} \tilde{m}^A) \}. \quad (175)$$

6.5.2. Vágási felülettel létrehozott hibák (vonalhibák)

Az előző pontban kapott általános összefüggéseket alkalmazhatjuk vonalmenti hibák deformációttereinek meghatározására és kölcsönhatásának leírására. Ehhez a (173) kifejezésben szereplő \mathbf{a} és $\boldsymbol{\Omega}$ vektorokat kell megfelelően megadnunk. A vonalmenti hibák létrehozásakor választunk egy S felületet, amely egy zárt C görbében végződik. A felület normál vektorát az 1. ábrának megfelelően választjuk meg. Az S vágási felület két oldalát merevtestszerűen elmozdítjuk a (134) kifejezésnek megfelelően. Kézenfekvő, hogy a (135), (136) kifejezésekben szereplő S' felületet azonosítsuk S -sel és legyen

$$a_k(\mathbf{r}') = a_k^L(\mathbf{r}') = b_k + \varepsilon_{kpq} \Omega_p (x'_q - x_q^0), \quad (176)$$

$$\Omega_k(\mathbf{r}') = \Omega_k^L = \text{áll.} \quad (177)$$

Ezzel a választással a (169), (170) kifejezések a (132), (133) szimmetria relációk felhasználásával automatikusan adják a (135), (136) elmozdulás tereket. A (171) egyenletből a kölcsönhatási energiát határozhatjuk meg. Érdekes megvizsgálni a vonalmenti hibára ható külső deformációs térből származó erőt. A (172) kifejezést a Stokes-tétel segítségével átalakítjuk és a következő általános erő kifejezést kapjuk:

$$\begin{aligned} f_n \equiv & \varepsilon_{inl} \oint_C (\sigma_{ik}^A a_k + m_{ik}^A \Omega_k) dx_l + \varepsilon_{ijl} \oint_C (\sigma_{in}^A a_j + m_{in}^A \Omega_j) dx_l + \\ & + \int_{S'} (\sigma_{ik}^A a_{k,i} + m_{ik}^A \Omega_{k,i}) dS'_n + \int_{S'} (\sigma_{in}^A a_{j,i} + m_{in}^A \Omega_{j,i}) dS'_j - \int_{S'} (\sigma_{ik}^A a_{k,n} + m_{ik}^A \Omega_{k,n}) dS'_i - \\ & - \int_{S'} (\sigma_{in}^A a_{j,j} + m_{in}^A \Omega_{j,j}) dS'_i + \int_{S'} m_{ik,i}^A \Omega_k dS'_n + \int_{S'} m_{in,i}^A \Omega_j dS'_j. \end{aligned} \quad (178)$$

A (178) kifejezésben szereplő vonalmenti integrálokat az 1. ábrán látható C görbére vonatkoztatjuk. Diszlokáció esetében ($a_i^L = b_i$ és $\Omega_i = 0$) a felületi integrálok eltűnnek, és csak a vonalmenti integrál marad vissza, amely nem függ a felület választásától, azaz

$$f_n^{\text{diszl}} = - \oint_C \varepsilon_{nil} \sigma_{ik}^A b_k dx_l + \oint_C \varepsilon_{jil} \sigma_{in}^A b_j dx_l. \quad (179)$$

Ez az eredmény a (4.2.) pontbeli erőformula általánosítása mikropoláros esetre. Könnyen belátható a klasszikus esethez hasonlóan, hogy a tiszta hidrosztatikus feszültség nem eredményez erőhatást diszlokáció esetében.

Ha a diszklinációra ható erőt vizsgáljuk, akkor ($b_l=0$, $\Omega_p^L=\text{áll.}$) az eredő erő felületi integrált is tartalmaz:

$$f_n^{\text{diszk}} = \varepsilon_{inl} \oint_C (\sigma_{ik}^A \varepsilon_{kpq} \Omega_p^L (x'_q - x_q^0) + m_{ik}^A \Omega_k^L) dx_l + \varepsilon_{ijl} \oint_C (\sigma_{in}^A \varepsilon_{jpn} \Omega_p^L (x'_q - x_q^0) + m_{in}^A \Omega_j^L) dx_l + \\ + \int_{S'} (\sigma_{in}^A \varepsilon_{jpi} \Omega_p^L - \sigma_{pi}^A \varepsilon_{npi} \Omega_j^L) dS_j - \int_{S'} \varepsilon_{kpn} \sigma_{ik}^A \Omega_p^L dS_i. \quad (180)$$

Az utóbbi kifejezés számításakor kihasználtuk azt, hogy

$$m_{mp,m}^A + \varepsilon_{pml} \sigma_{ml}^A = 0,$$

azaz a külső deformációs tér nem térfogati nyomatóéktól származik.

6.5.3. Zárt felülettel határolt hibák (homogén térfogati hibák)

Határolja a V térfogatot az S felület és definiáljuk a felületmenti pólusokat a következő \mathbf{a} és Ω mennyiségekkel:

$$a_l(\mathbf{r}') = \begin{cases} u_l^T(\mathbf{r}') & \mathbf{r}' \in V, \\ 0 & \mathbf{r}' \notin V, \end{cases} \quad (181)$$

$$\Omega_l(\mathbf{r}') = \begin{cases} \varphi_l^T(\mathbf{r}') & \mathbf{r}' \in V, \\ 0 & \mathbf{r}' \notin V. \end{cases} \quad (182)$$

Az így megadott póluseloszlás egy térfogati hibát állít elő. A (169), (170) egyenletek, a Gauss-tétel, valamint a (120), (121) (128—133) egyenletek és a

$$G_{lj,m'i'} = G_{lj,mi}, \quad \varepsilon_{lmn} C_{iknm} = 2\alpha \varepsilon_{ikl}, \quad \varepsilon_{lmn} \varepsilon_{pmn} = 2\delta_{pl}$$

összefüggések felhasználásával a következő elmozdulástereket adják:

$$u_j(\mathbf{r}) = \begin{cases} \int_V (\sigma_{ml}^T G_{jl,m'}^F + m_{ml}^T G_{jl,m'}^L - \varepsilon_{lmn} \sigma_{mn}^T G_{jl}^L) dV' - u_j^T, & \mathbf{r} \in V, \\ \int_V (\sigma_{ml}^T G_{jl,m'}^F + m_{ml}^T G_{jl,m'}^L - \varepsilon_{lmn} \sigma_{mn}^T G_{jl}^L) dV', & \mathbf{r} \notin V \end{cases} \quad (183)$$

$$\varphi_j(\mathbf{r}) = \begin{cases} \int_V (\sigma_{ml}^T g_{jl,m'}^F + m_{ml}^T g_{jl,m'}^L - \varepsilon_{lmn} \sigma_{mn}^T g_{jl}^L) dV' - \varphi_j^T, & \mathbf{r} \in V, \\ \int_V (\sigma_{ml}^T g_{jl,m'}^F + m_{ml}^T g_{jl,m'}^L - \varepsilon_{lmn} \sigma_{mn}^T g_{jl}^L) dV', & \mathbf{r} \notin V. \end{cases} \quad (184)$$

A (183), (184) egyenletek a homogén térfogati hibák elmozdulásterének általánosítását adják meg mikropoláros közeg esetére.

A térfogati hiba teljes erősségét a (167), (168) egyenletek integrálásával határozzuk meg:

$$P_{lm}^F = - \int_V C_{iklm} u_{k,l}^T dV' = - \int_V (\sigma_{ml}^T + 2\alpha \varepsilon_{mlj} \varphi_j^T) dV', \quad (185)$$

$$P_{lm}^L = - \int_V D_{iklm} \varphi_{k,i}^T dV' = - \int_V m_{ml}^T dV', \quad (186)$$

ahol a (120), (121) egyenleteket és a Gauss-tételt használtuk fel.

A (185), (186) egyenletekből kitűnik, hogy a homogén térfogati hibát leíró póluseloszlás térfogati eloszlásként is interpretálható, amelynek sűrűség függvénye a következő:

$$P_{lm}^F = -(\sigma_{ml}^T + 2\alpha\epsilon_{mlj}\varphi_j^T), \quad (187)$$

$$P_{lm}^L = -m_{ml}^T. \quad (188)$$

A két utóbbi egyenlet felhasználásával a (162) és (172) kifejezésekből az

$$U = - \int_V (\sigma_{ik}^A \gamma_{ik}^T + m_{ik}^A \varphi_{k,i}^T) dV'$$

kölcsönhatási energia és az

$$f_n = \int_V (\sigma_{ik,n}^A \gamma_{ik}^T + m_{ik}^A \varphi_{k,i}^T + \sigma_{in,j}^A u_{j,i}^T + m_{in,ji}^A \varphi_j^T + m_{in,j}^A \varphi_{j,i}^T) dV \quad (189)$$

erő adódik a $2\alpha\epsilon_{mlj} = \epsilon_{jki} C_{mlki}$ összefüggés segítségével. A számításokból kitűnik, hogy a klasszikus esethez hasonlóan a γ_{ik}^T és $\varphi_{k,i}^T$ mennyiségek ismeretében a homogén térfogati hiba összes tulajdonsága lezármaztatható.

7. TRANSZVERZÁLIS ÉS LONGITUDINÁLIS HULLÁM KONVERZIÓ RUGALMAS ANYAGOKBAN PÓLUSOK ÁLTAL

A 6.5. fejezetben láttuk, hogy a különböző kristályhibák rugalmas tulajdonságai egységesen tárgyalhatók a mikropoláros pólusok segítségével. A következőkben a pólusok egy érdekes felhasználását mutatjuk be a rugalmas hullámok terjedésével kapcsolatban [49].

A nem-poláros kontinuum, a benne jelenlevő póluseloszlás hatására, bizonyos feltételek teljesülése esetén, polárossá válhat. Tételezzük fel, hogy az anyag egy tetszőlegesen kiválasztott ΔV makrotérfogat eleme N pólust tartalmaz. Ha az ilyen anyagot deformáljuk, akkor egy hibamentes anyaghoz képest a kiválasztott ΔV térfogatra egy járulékos erő és nyomaték hat. A nyomaték megjelenése az ilyen anyagot polarizálja, így szükségessé válik a poláros anyagok leírására kidolgozott kontinuum mechanikai módszerek alkalmazása. A jelenlevő póluseloszlás következtében csatolás jelenik meg az elmozdulás és mikroforgás terek között és ez megváltoztatja a rugalmas hullámok terjedési viszonyait is.

7.1. Az átlagos erőssűrűség és nyomatéksűrűség meghatározása

A következőkben olyan anyagokat vizsgálunk, amelyekben a kristályhibákat, azaz a pólusokat csak ponterőkből építjük fel. Így a (147), (148) egyenletekből következik, hogy a \tilde{P}^F tenzor szimmetrikus lesz. A legtöbb hiba, mint a 6.5 fejezetben láttuk, elsőrendű pólusok segítségével írható le, ezért a következőkben elegendő a P_{ik}^T típusú tenzor felhasználása. Ebből az az előny is származik, hogy a későbbiekben felállított hullámegyenlet másodrendű differenciálegyenlet marad. A további számításainkban feltételezzük, hogy a polarizációt okozó pólus szimmetrikus dilatációs

centrum, azaz:

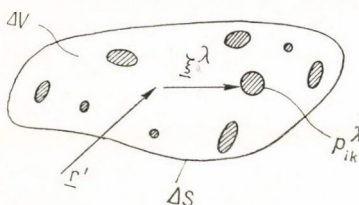
$$P_{ik}^F = P\delta_{ik}, \quad (190)$$

$$P_{ik}^L = 0. \quad (191)$$

Külső deformációs tér jelenléte esetén a pólusra ható erőt a (189) egyenletből kapjuk meg:

$$\tilde{f}_n = P\delta_{ki}\gamma_{ik,n'}(\mathbf{r}'). \quad (192)$$

Egy tetszőleges ΔV makrotérfogatelem tartalmazzon $N P^\lambda \delta_{ik}$ pólust $\lambda=1, 2, \dots, N$. A térfogatelem tömegközéppontjából az egyes $P^\lambda \delta_{ik}$ pólusokhoz húzott vektorokat jelöljük ζ^λ -val. Legyen ΔV -ben jelen egy γ_{ik} , nem a pólusoktól származó deformációs tér. Ekkor meghatározhatjuk a térfogatelemre ható teljes erőt és nyomatékot, amely a hibák jelenléte miatt keletkezik (3. ábra). A térfogati erő a (192) egyenletből adódik:



$$\overline{\Delta F}_n = \sum_{\lambda=1}^N P^\lambda \delta_{ik} \gamma_{ik,n'}(\mathbf{r}', \zeta^\lambda). \quad (193)$$

3. ábra. Pólusok a mikropoláros anyag ΔV térfogatelemében

A forgatónyomaték általában két részből tevődhet össze. Egyrészt a ΔV -ben levő pólusokra ható erők \mathbf{r}' pontra számított nyomatékából, másrészt

az egyes pólusokra ható forgatónyomatékok összegéből, amely a jelen esetben szimmetrikus dilatációs centrumra zérus. Így az átlagos forgatónyomaték a

$$\overline{\Delta L}_t = \sum_{\lambda=1}^N \varepsilon_{tmn} \zeta_m^\lambda P^\lambda \delta_{ik} \gamma_{ik,n'}(\mathbf{r}' + \zeta^\lambda) \quad (194)$$

alakban adható meg. A (193) és (194) kifejezésekben az \mathbf{u} és Φ vektortereket sorbafejtethetjük az \mathbf{r}' hely környezetében. Így a $P^\lambda \delta_{ik}$ tenzorok különböző rendű momentumai jelennek meg. Ha γ_{ik} nem változik túl gyorsan, akkor elfogadhatjuk a nulladrendű közelítést és így az erősűrűség és nyomatéksűrűség a következő alakban adható meg:

$$f_n = P\delta_{ik}\gamma_{ik,n}(\mathbf{r}'), \quad (195)$$

$$l_t = \varepsilon_{tmn} P\delta_{ik} \zeta_m \gamma_{ik,n}(\mathbf{r}'), \quad (196)$$

amely kifejezésekben a következő egyszerűsítő jelöléseket vezettük be:

$$P = \frac{1}{\Delta V} \sum_{\lambda=1}^N P^\lambda \quad (197)$$

$$\frac{1}{\Delta V} \sum_{\lambda=1}^N P^\lambda \zeta_m^\lambda = P\zeta_m; \quad \zeta_m = \frac{\sum_{\lambda} P^\lambda \zeta_m^\lambda}{\sum_{\lambda} P^\lambda}. \quad (198)$$

A P és ζ mennyiségekről a továbbiakban feltételezzük, hogy nem függenek a helytől, azaz minden ΔV térfogatelemben azonosak a hibák is és az irányítottságuk is. (pl. sűrűn elhelyezkedő irányított szennyező-vakancia, vagy $A-B$ atom párok stb.)

7.2. A hullámegyenlet előállítás

A következőkben megvizsgáljuk a mikropoláros közegben terjedő hullámokat az előzőkben megadott pólusok jelenlétében. Látni fogjuk, hogy a pólusok jelenléte miatt a mikropoláros effektus a klasszikus anyagra való áttérés után is megmarad.

A (195), (196) kifejezéseket a (118a), (118b) egyensúlyi egyenletekből nyert mozgásegyenletekbe [44] helyettesítjük. Így előállítjuk a rugalmas hullámokat leíró kifejezéseket olyan kontinuumban, amelyet a pólusok jelenléte polarizált. Az egyenletek a következők:

$$C_{iklm} u_{l,mi} - 2\alpha \varepsilon_{ikm} \varphi_{m,i} + P \delta_{ji} u_{j,ik} - \varrho \ddot{u}_k = 0, \quad (199)$$

$$D_{iklm} \varphi_{l,mi} + 2\alpha \varepsilon_{kmn} u_{m,n} - 4\alpha \varphi_k + \varepsilon_{kmn} P \delta_{ji} \zeta_m u_{j,in} - \varrho j \ddot{\varphi}_k = 0, \quad (200)$$

ahol ϱ az anyag sűrűsége, j a mikrotehetetlenségi nyomaték. A (199), (200) egyenletek átírhatók vektoros formában a (122), (123) kifejezésekkel definiált rugalmas állandók felhasználásával:

$$(\lambda + \mu - \alpha) \nabla(\nabla \mathbf{u}) + P \nabla(\nabla \mathbf{u}) + (\mu + \alpha) \Delta \mathbf{u} - 2\alpha \nabla \times \boldsymbol{\varphi} - \varrho \ddot{\mathbf{u}} = 0, \quad (201)$$

$$(\beta + \gamma - \varepsilon) \nabla(\nabla \boldsymbol{\varphi}) + (\gamma + \varepsilon) \Delta \boldsymbol{\varphi} + 2\alpha \nabla \times \mathbf{u} - 4\alpha \boldsymbol{\varphi} + \zeta \times P \nabla(\nabla \mathbf{u}) - \varrho j \ddot{\boldsymbol{\varphi}} = 0. \quad (202)$$

A két egyenletben a póluseloszlás jelenléte miatt, a $P \nabla(\nabla \mathbf{u})$ kifejezésen keresztül újabb csatolás jelenik meg, amely még ebben a legegyszerűbb esetben is anizotróppá teszi a hullámterjedést.

7.3. A hullámegyenlet megoldása

A hullámterjedés leírásához a (201), (202) egyenletrendszer kell megoldanunk. Az egyszerűség kedvéért végtelen közeget tételezünk fel. A Δ Laplace operátor definíciójának felhasználásával a (201), (202) egyenleteket a következő alakba írjuk át:

$$(\lambda + 2\mu + P) \nabla(\nabla \mathbf{u}) - (\mu + \alpha) \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + 2\alpha \nabla \times \boldsymbol{\varphi} = \varrho \ddot{\mathbf{u}}, \quad (203)$$

$$(\beta + 2\gamma) \nabla(\nabla \boldsymbol{\varphi}) - (\gamma + \varepsilon) \nabla \times \nabla \times \boldsymbol{\varphi} + 2\alpha \nabla \times \mathbf{u} - 4\alpha \boldsymbol{\varphi} + P \zeta \times \nabla(\nabla \mathbf{u}) = \varrho j \ddot{\boldsymbol{\varphi}}. \quad (204)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$a_1^2 = \frac{1}{\varrho} (\lambda + 2\mu + P), \quad a_2^2 = \frac{\mu}{\varrho}, \quad a_3^2 = \frac{\alpha}{\varrho},$$

$$a_4^2 = \frac{\gamma + \varepsilon}{\varrho j}, \quad a_5^2 = \frac{\beta + 2\gamma}{\varrho j}, \quad \omega_0^2 = \frac{\alpha}{\varrho j}, \quad a_6^2 = \frac{P}{\varrho j}.$$

akkor a (203), (204) egyenletek az

$$a_1^2 \nabla(\nabla \mathbf{u}) - (a_2^2 + a_3^2) \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + 2a_3^2 \nabla \times \boldsymbol{\varphi} = \ddot{\mathbf{u}}, \quad (205)$$

$$a_5^2 \nabla(\nabla \boldsymbol{\varphi}) - a_4^2 \nabla \times \nabla \times \boldsymbol{\varphi} + 2\omega_0^2 \nabla \times \mathbf{u} - 4\omega_0^2 \boldsymbol{\varphi} + a_6^2 \zeta \times \nabla(\nabla \mathbf{u}) = \ddot{\boldsymbol{\varphi}} \quad (206)$$

alakba mennek át. A megoldást a szokásos módon vektor és skalár potenciálok segítségével állítjuk elő. Ezek legyenek a következők:

$$\mathbf{u} = \nabla u + \nabla \times \mathbf{U}, \quad \nabla \mathbf{U} = 0, \quad (207)$$

$$\boldsymbol{\phi} = \nabla \Phi + \nabla \times \boldsymbol{\psi}, \quad \nabla \boldsymbol{\psi} = 0. \quad (208)$$

A (207), (208) potenciálokat (203), (206)-ba helyettesítjük, felhasználjuk a divergencia mentesség feltételeit, valamint, mivel $\zeta = \text{áll}$, a $\zeta \times \nabla(\Delta u) = -\nabla \times \zeta \Delta u$ azonosságot és így a következő egyenletrendszerhez jutunk:

$$a_1^2 \Delta u - \ddot{u} = 0, \quad (209)$$

$$a_5^2 \Delta \Phi - 4\omega_0^2 \Phi - \ddot{\Phi} = 0, \quad (210)$$

$$(a_2^2 + a_3^2) \Delta \mathbf{U} + 2a_3^2 \nabla \times \boldsymbol{\psi} - \ddot{\mathbf{U}} = 0, \quad (211)$$

$$a_4^2 \Delta \boldsymbol{\psi} + 2\omega_0^2 \nabla \times \mathbf{U} - 4\omega_0^2 \boldsymbol{\psi} - a_6^2 \zeta \Delta u - \ddot{\boldsymbol{\psi}} = 0. \quad (212)$$

Látható, hogy a (209), (210) egyenletek függetlenek, belőlük az u és Φ skalár-hullám megoldások könnyen megkaphatók. Ezek gradiense megadja a longitudinális elmozdulás és longitudinális-mikrorotációs hullámokat [44]. Új azonban, hogy (212) a ζ vektoron keresztül csatolt a longitudinális elmozdulás hullámhoz. A (212) egyenlet ezáltal inhomogenné válik. Az új tag olyan külső gerjesztésként is felfogható, amelynek segítségével transzverzális hullámokat lehet kelteni.

A (209), (210) egyenletek megoldásait síkhullám alakjában keresve, a terjedési sebességekre a következő kifejezéseket kapjuk:

$$v_1^2 = \frac{1}{\rho} (\lambda + 2\mu + P), \quad (213)$$

$$v_2^2 = \frac{\beta + 2\gamma}{\rho j \left[1 - \left(\frac{2\omega_0}{\omega_2} \right)^2 \right]} = \frac{\beta + \gamma}{\rho j \left(1 - \frac{4\alpha}{\rho j \omega_2^2} \right)}. \quad (214)$$

A (213) kifejezés azt mutatja, hogy a longitudinális elmozdulás hullámok terjedési sebessége megváltozik a pólusok jelenléte miatt. A longitudinális-mikrorotációs hullámok a szokásos disperziót és levágási frekvenciát mutatják $2\omega_0 = \omega_2$ -nél, ahol ω_2 a Φ skalár hullámok körfrekvenciája [44].

A (211), (212) egyenletek megoldásához tegyük fel, hogy az anyagon a (209) egyenleteket kielégítő $u(\mathbf{r}, t)$ potenciállal jellemezhető longitudinális hullám halad végig. Képezzük az egyenletek Fourier-transzformáltját és használjuk fel a következő jelöléseket és transzformációs összefüggéseket:

$$\mathcal{F}[\mathbf{U}] = \tilde{\mathbf{U}}(\mathbf{k}, t), \quad \mathcal{F}[\boldsymbol{\psi}] = \tilde{\boldsymbol{\psi}}(\mathbf{k}, t), \quad (215)$$

$$\mathcal{F}[\Delta \mathbf{U}] = -k^2 \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathcal{F}[\Delta \boldsymbol{\psi}] = -k^2 \tilde{\boldsymbol{\psi}}, \quad (216)$$

$$\mathcal{F}[\nabla \times \mathbf{U}] = -i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathcal{F}[\nabla \times \boldsymbol{\psi}] = -i\mathbf{k} \times \tilde{\boldsymbol{\psi}}, \quad (217)$$

$$\mathcal{F}[\nabla \mathbf{U}] = -i\mathbf{k} \tilde{\mathbf{U}}, \quad \mathcal{F}[\nabla \boldsymbol{\psi}] = -i\mathbf{k} \tilde{\boldsymbol{\psi}}. \quad (218)$$

A transzformált egyenletek a következők lesznek:

$$(a_2^2 + a_3^2)k^2 \tilde{\mathbf{U}} + 2ia_3^2 \mathbf{k} \times \tilde{\Psi} + \ddot{\tilde{\mathbf{U}}} = 0, \quad (219)$$

$$a_4^2 k^2 \tilde{\Psi} + 2i\omega_0^2 \mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}} + 4\omega_0^2 \tilde{\Psi} - a_6^2 \zeta k^2 \tilde{u} + \ddot{\tilde{\Psi}} = 0. \quad (220)$$

Ezek közönséges inhomogén differenciál egyenletek, amelyekhez tartozó homogén egyenletrendszer megoldását az $\tilde{\mathbf{U}}^H = \tilde{\mathbf{U}}_0 e^{-i\omega t}$ és $\tilde{\Psi}^H = \tilde{\Psi}_0 e^{-i\omega t}$ alakban keressük. Ekkor a két megoldandó vektoregyenlet a következő lesz:

$$(a_2^2 + a_3^2)k^2 \tilde{\mathbf{U}}_0^H + 2ia_3^2 \mathbf{k} \times \tilde{\Psi}_0^H - \omega^2 \tilde{\mathbf{U}}_0^H = 0, \quad (221)$$

$$a_4^2 k^2 \tilde{\Psi}_0^H + 2i\omega_0^2 \mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^H + 4\omega_0^2 \tilde{\Psi}_0^H - \omega^2 \tilde{\Psi}_0^H = 0. \quad (222)$$

A (221) egyenletet balról \mathbf{k} -val vektoriálisan szorozzuk, felhasználjuk a $\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \tilde{\Psi}_0^H = -k^2 \tilde{\Psi}_0^H$ azonosságot (mivel $\nabla \Psi^H = 0$) így $\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^H$ kifejezhető

$$\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^H = \frac{2ia_3^2 k^2 \tilde{\Psi}_0^H}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \omega^2}. \quad (223)$$

Ezt (222)-be behelyettesítve az

$$a_4^2 k^2 - \frac{4a_3^2 \omega_0^2 k^2}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \omega^2} + 4\omega_0^2 - \omega^2 = 0 \quad (224)$$

összefüggést kapjuk, amely megadja a transzverzális elmozdulás és -rotációs hullámok diszperzióját [44, 50].

Számunkra érdekesebb az inhomogén egyenlet megoldása, amely a longitudinális hullámok által gerjesztett rotációs hullámok terjedését adja meg. Haladjon az anyagon keresztül most is egy

$$u = u_0(\mathbf{r})e^{-i\Omega t} \quad (225)$$

skalárpotenciállal megadott hullám, amely kielégíti a (209) egyenletet. A $\tilde{\Psi}_0^p$ és $\tilde{\mathbf{U}}_0^p$ megoldások előállításához helyettesítsük (225)-öt (220)-ba, majd a $\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \tilde{\Psi}_0^p = -k^2 \tilde{\Psi}_0^p$, ($\nabla \Psi^p = 0$) azonosság felhasználásával $\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^p$ -t fejezzük ki (219)-ből:

$$\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^p = \frac{2ia_3^2 k^2 \tilde{\Psi}_0^p}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2}. \quad (226)$$

Ezt (220)-ba helyettesítve, $\tilde{\Psi}_0^p$ kifejezhető \tilde{u}_0 függvényeként, amely $u_0(\mathbf{r})$ transzformáltját jelöli:

$$\tilde{\Psi}_0^p = \frac{a_6^2 \zeta k^2 \tilde{u}_0}{a_4^2 k^2 - \frac{4a_3^2 \omega_0^2 k^2}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2} + 4\omega_0^2 - \Omega^2}. \quad (227)$$

(226)-ot balról \mathbf{k} -val vektoriálisan szorozva és a $\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{U}}_0^p = -k^2 \tilde{\mathbf{U}}_0^p$ ($\nabla \mathbf{U}^p = 0$) összefüggést felhasználva, a másik keresett megoldás is előállítható:

$$\tilde{\mathbf{U}}_0^p = -\frac{2ia_3^2 \mathbf{k} \times \tilde{\Psi}_0^p}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2}. \quad (228)$$

Ismert \tilde{u}_0 esetén a (227), (228) egyenletek inverz-Fourier transzformáltjai adják meg a keresett vektorpotenciálokat és ezek a deformációs tereket. Vizsgáljuk azt az esetet, amikor $u(\mathbf{r}, t)$ egy tiszta síkhullám potenciálja, azaz:

$$u(\mathbf{r}, t) = u_0(\mathbf{r})e^{-i\Omega t} = u_0e^{ik^1r - i\Omega t}. \quad (229)$$

A (229) kifejezésben szereplő \mathbf{k}^1 hullámszám vektort a (209) egyenletből határozzuk meg, mert (229) ennek megoldása:

$$k^1 = \frac{\Omega}{a_1}. \quad (230)$$

Szükségünk van az $u_0(\mathbf{r})$ függvény Fourier-transzformáltjára, amely könnyen kiszámítható:

$$\tilde{u}_0(\mathbf{r}) = u_0(2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_\Omega^1). \quad (231)$$

(231)-et felhasználva (227)-ből Ψ^p -t meghatározhatjuk:

$$\Psi^p(\mathbf{r}, t) = a_6^2 \zeta u_0 e^{-i\Omega t} \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_\Omega^1) k^2 d^3\mathbf{k}}{a_4^2 k^2 - \frac{4a_3^2 \omega_0^2 k^2}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2} + 4\omega_0^2 - \Omega^2}. \quad (232)$$

Az \mathbf{U}^p függvényt (232) felhasználásával (228) adja meg:

$$\mathbf{U}^p(\mathbf{r}, t) = -2ia_3^2 a_6^2 u_0 e^{-i\Omega t} \int \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \mathbf{k} \times \zeta k^2 \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}_\Omega^1) d^3\mathbf{k}}{[(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2] \left[a_4^2 k^2 - \frac{4a_3^2 \omega_0^2 k^2}{(a_2^2 + a_3^2)k^2 - \Omega^2} + 4\omega_0^2 - \Omega^2 \right]}. \quad (233)$$

A (232), (233) integrálokat (230) behelyettesítéssel könnyen kiszámíthatjuk, ami után a

$$\Psi^p(\mathbf{r}, t) = a_6^2 u_0 e^{ik^1r - i\Omega t} \frac{\Omega^2 (a_2^2 + a_3^2 - a_1^2)}{f(\Omega)} \zeta, \quad (234)$$

$$\mathbf{U}^p(\mathbf{r}, t) = -2ia_3^2 a_6^2 u_0 e^{ik^1r - i\Omega t} \frac{a_1 \Omega \mathbf{n} \times \zeta}{f(\Omega)} \quad (235)$$

megoldások adódnak, ahol

$$f(\Omega) = (a_4^2 - a_1^2)(a_2^2 + a_3^2 - a_1^2) \Omega^2 + 4\omega_0^2 a_1^2 (a_2^2 - a_1^2), \quad (236)$$

és \mathbf{n} , \mathbf{k}^1 irányú egységvektort jelöl.

A (234), (235) potenciálokból rotációképzéssel kapjuk meg az indukált elmozdulás és elfordulás hullámokat. A differenciálás során felhasználjuk a

$$\nabla \times \zeta \mathbf{u} = -\zeta \times \nabla \mathbf{u}, \quad \nabla \times \mathbf{n} \times \zeta \mathbf{u} = \nabla \mathbf{u} \times \mathbf{n} \times \zeta$$

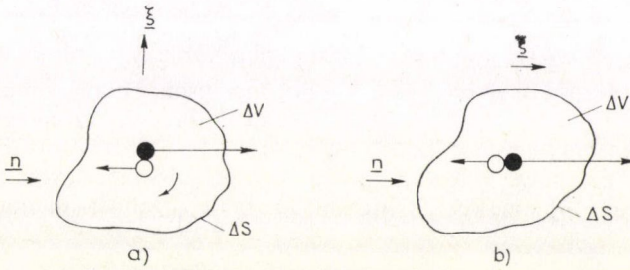
összefüggéseket. Így a mikroforgás és elmozdulásterek indukált része (amely a homogen megoldásra szuperponálódik), a következő lesz:

$$\Phi^p = \nabla \times \Psi^p = iu_0 e^{ik^1r - i\Omega t} \Omega^3 \frac{(a_2^2 + a_3^2 - a_1^2) a_6^2}{f(\Omega) \cdot a_1} \mathbf{n} \times \zeta, \quad (237)$$

$$\mathbf{u}^p = \nabla \times \mathbf{U}^p = 2a_3^2 a_6^2 u_0 e^{ik^1r - i\Omega t} \frac{\Omega^2}{f(\Omega)} \mathbf{n} \times \mathbf{n} \times \zeta. \quad (238)$$

7.4. Az irányfüggés értelmezése

A deformációs tereket leíró (237), (238)-ból látható, hogy \mathbf{u}^p és $\boldsymbol{\varphi}^p$ merőlegesek a longitudinális hullám terjedési irányára, valamint a polarizáltságot jellemző $\boldsymbol{\zeta}$ vektorra is. Továbbá $\boldsymbol{\varphi}^p$ és \mathbf{u}^p egymásra is merőleges transzverzális hullámok. Az irányfüggés helyessége könnyen belátható a 4. ábra alapján. A (197), (198) egyenletekből látható, hogy a kontinuum minden térfogatelemét az erő szempontjából egy P pólussal, a nyomaték szempontjából egy $P\delta_{ki}\zeta_m$ másodrendű pólussal jellemezzük. A beérkező longitudinális hullám iránya különböző orientációjú lehet $\boldsymbol{\zeta}$ -hoz képest. A 4. ábrán két szélsőséges esetet tüntettünk fel. Az a) esetben $\mathbf{n} \perp \boldsymbol{\zeta}$, így a hidrosztatikus feszültség kölcsönhat a térfogatelemhez rendelt pólussal és forgatónyomaték keletkezik, amely merőleges \mathbf{n} -re és $\boldsymbol{\zeta}$ -ra. A b) esetben $\mathbf{n} \parallel \boldsymbol{\zeta}$, ezért eredő nyomaték nincs és így $\boldsymbol{\varphi}^p$ és \mathbf{u}^p hullám sem keletkezik.



4. ábra. Forgatónyomaték keletkezése dipóluson

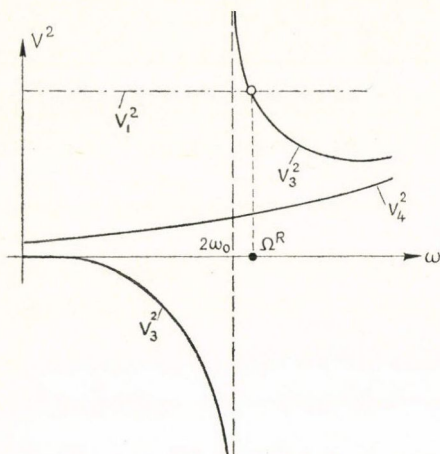
7.5. A rezonancia feltétele

Ha klasszikus anyagot vizsgálunk, azaz a_6 kivételével minden poláros rugalmas állandó zérus, a (237), (238) megoldások akkor is léteznek és mikropoláros hullámok keletkezését mutatják klasszikus kontinuumban. Ha a poláros rugalmas állandók különböznek zérustól, akkor a (237), (238) egyenletek nevezőjében szereplő $f(\Omega)$ függvény bizonyos feltételek mellett zérussá válhat. Ez azt jelenti, hogy a longitudinális hullámok, csillapítás híján, végtelen nagy amplitúdójú transzverzális hullámokat kelthetnek. Az $f(\Omega)=0$ egyenlet másodfokú és kétszeres gyöke van, amelyből következik, hogy egy pozitív Ω_R esetén lehetséges rezonancia. Az $f(\Omega)=0$ egyenlet megoldása a következő:

$$\Omega_R^2 = \frac{4\omega_0^2}{\left(1 - \frac{a_4^2}{a_1^2}\right)\left(1 + \frac{a_3^2}{a_2^2 - a_1^2}\right)}, \quad (239)$$

vagy a rugalmas állandókat behelyettesítve

$$\Omega_R^2 = \frac{4\omega_0^2}{\left(1 - \frac{\gamma + \varepsilon}{j(\lambda + 2\mu + \varrho)}\right)\left(1 - \frac{\alpha}{1 + \mu + \varrho}\right)}. \quad (240)$$



5. ábra. A rezonancia keletkezésének feltétele a diszperziós görbén

A (240) kifejezés további vizsgálata előtt érdemes megjegyezni, hogy a rezonancia esete azt jelenti, hogy a longitudinális elmozduláshullám sebessége az Ω_R frekvencián megegyezik a transzverzális hullám sebességével, amelyet (224) ad meg. A transzverzális hullámok lehetséges sebességeit Parfitt és Eringen [44, 51] részletesen vizsgálták. Eredményeik számukra fontos része a következő: A transzverzális hullámok sebességei v_3 és v_4 , a frekvencia függvényében az 5. ábrán látható módon változnak. A v_4 sebesség a teljes frekvencia tartományban létezik és mindig kisebb mint v_1 . A v_3 sebességgel haladó hullámok csak a $2\omega_0$ levágási frekvencia fölött léteznek, ez alatt v_3 képzetes, így a távolsággal exponenciálisan eltűnő hullámokat ad. A haladó hullámok rezonanciája akkor kö-

vetkezhethet be, ha a v_1^2 egyenes $2\omega_0$ fölött metszi a v_3^2 görbét. A továbbiakban ennek feltételeit vizsgáljuk meg. Felhasználjuk a rugalmas állandókra vonatkozó egyenlőtlenségi relációkat [44], amelyek az általunk használt rugalmas állandókkal felírva a következők:

$$0 \leq 3\lambda + 2\mu, \quad 0 \leq \mu, \quad 0 \leq \alpha, \quad \frac{\gamma + \varepsilon}{j} > \mu + \alpha. \quad (241)$$

A (240)-ben szereplő P rugalmas állandó kis póluskoncentráció esetén biztos sokkal kisebb, mint $\lambda + \mu$. P értéke azonban lehet pozitív vagy negatív, attól függően, hogy milyen mérethatású pólusok dominálnak a térfogatelemekben. Ezért hatása csak abban áll, hogy a $\lambda + \mu \gg P$ feltétellel nyert Ω_R értékét kismértékben módosítja. Így (240) a következő lesz:

$$\Omega_R^2 = \frac{4\omega_0^2}{\left[1 - \frac{\gamma + \varepsilon}{j(\lambda + 2\mu)}\right] \left[1 - \frac{\alpha}{\lambda + \mu}\right]}. \quad (242)$$

Mivel az $\Omega_R^2 \geq 4\omega_0^2 > 0$ feltételnek teljesülnie kell, ezért (242)-ből következik, hogy

$$\left[1 - \frac{\gamma + \varepsilon}{j(\lambda + 2\mu)}\right] \left[1 - \frac{\alpha}{\lambda + \mu}\right] \leq 1, \quad (243)$$

és

$$\left[1 - \frac{\gamma + \varepsilon}{j(\lambda + 2\mu)}\right] \left[1 - \frac{\alpha}{\lambda + \mu}\right] > 0. \quad (244)$$

Tegyük fel először, hogy $\alpha > \lambda + \mu$. Ekkor (243) és (244)-ből

$$\frac{\gamma + \varepsilon}{j} > \lambda + 2\mu \quad \text{és} \quad \frac{\gamma + \varepsilon}{j} < (\lambda + 2\mu) \frac{\alpha}{\alpha - (\lambda + \mu)},$$

amivel

$$\lambda + 2\mu < \frac{\gamma + \varepsilon}{j} < (\lambda + 2\mu) \frac{\alpha}{\alpha - (\lambda + \mu)}. \quad (245)$$

Ez utóbbi egyenlőtlenség teljesülése esetén következik be a rezonancia. Ha $\alpha < \lambda + \mu$, akkor az előbbi esethez hasonlóan:

$$\frac{\gamma + \varepsilon}{j} < \lambda + 2\mu, \quad \text{és} \quad \frac{\gamma + \varepsilon}{j} > (\lambda + 2\mu) \frac{\alpha}{\lambda + \mu - \alpha}.$$

Ez a két egyenlőtlenség akkor nem ellentmondó, ha $\lambda + \mu > 2\alpha$, amivel a rezonancia feltétele:

$$\lambda + 2\mu > \frac{\gamma + \varepsilon}{j} > \lambda + 2\mu \frac{\alpha}{\lambda + \mu - \alpha}. \quad (246)$$

A (245), (246)-tól eltérő esetekben csak kényszerrezgést kapunk.

7.6. Következtetések

A deformációs tereket leíró (237), (238) egyenletek monopólusok által polarizált kontinuumban longitudinális hullámok által keltett transzverzális rezgések terjedését adják meg. A $2\omega_0$ levágási frekvencia feletti gerjesztések rezonanciát idézhetnek elő. Véges kontinuumban a határfeltételek miatt a feladat nagyon elbonyolódik, de megfelelő anyag esetében talán kísérletileg is megfigyelhetők a rotációs hullámok, amelyek a polárosság bizonyítékai lennének.

8. ÖSSZEFOGLALÁS

A dolgozatban a kristályhibák kontinuum modelljeit tárgyaltuk. Megmutattuk, hogy a rugalmas pólusok (szingularitások) fogalmának alkalmazásával a kristályhibák tulajdonságainak leírására egységes elmélet dolgozható ki, amely egyaránt alkalmazható klasszikus és nem klasszikus (nem lokális és mikropoláros) kontinuumokra. Példaként megmutattuk, hogy pólusok jelenlétében a klasszikusan rugalmas test is mutathat mikropoláros effektust.

IRODALOM

1. R. de Wit, *Solid State Physics*, 10, 249, 1960.
2. F. R. N. Nabarro, *Theory of Crystal Dislocations*, Clarendon Press, Oxford, 1967.
3. T. Mura, *Advances in Mater. Res.*, 3, 1, 1968.
4. A. M. Kosevich, *Dislocations in Solids*, Vol. I., *The Elastic Theory*, ed. F. R. N. Nabarro, North-Holland, Amsterdam, 197 p.
5. Chatel P. és Kovács I., *Magyar Fiz. Folyóirat*, 13, 182, 1965.
6. Kovács I. és Chatel P., *Magyar Fiz. Folyóirat*, 12, 385, 1965.
7. Kovács I., *Magyar Fiz. Folyóirat*, 18, 1, 1970.
8. I. Kovács, *Physica*, 94B, 177, 1978.
9. I. Kovács and G. Vörös, *Physica*, 96B, 111, 1979.
10. R. K. T. Hsieh, G. Vörös and I. Kovács, *Physica*, 101B, 201, 1980.

11. E. Kröner, *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, Springer Verlag, Berlin, 1958.
12. A. E. H. Love, *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity*, University Press, Cambridge, 1959.
13. R. Siems, *phys. stat. sol.* **30**, 645, 1968.
14. Kovács I. és Zsoldos L., *Diszlokációk és képlékeny alakváltozás*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1965.
15. V. Volterra, *Ann. Ec. Norm.* **24**, 400, 1907.
16. G. I. Taylor, *Proc. Roy. Soc. A145*, 362, 1934.
17. E. Orowan, *Z. Phys.* **84**, 634, 1934.
18. M. Polányi, *Z. Phys.* **84**, 660, 1934.
19. J. M. Burgers, *Proc. Acad. Sci. Amsterdam*, **42**, 378, 1939.
20. M. Peach and J. S. Koehler, *Phys. Rev.* **80**, 436, 1950.
21. J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, Mc. Graw-Hill, New York, 1968.
22. J. W. Christian and J. Vitek, *Rep. Progr. Phys.* **33**, 307, 1970.
23. J. W. Steeds, *Introduction to Anisotropic Elasticity Theory of Dislocations*, Clarendon Press, Oxford, 1973.
24. R. de Wit, *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, Vol. I., eds.: J. A. Simmons et al., *Nat. Bur. Stand. (U.S.) Spec. Publ.* **317**, 1970. p. 651.
25. R. de Wit, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **77a**, 49, 359, 607, 1973.
26. W. F. Harris, *Surface and Defect Properties of Solids*, Vol. 3., Burlington House, London, 1974. p. 57.
27. K. H. Anthony, *Arch. Rat. Mech. Anal.* **39**, 43, 1970.
28. T. Mura, *Arch. Mech.* **24**, 449, 1972.
29. K. H. Anthony, U. Essmann, A. Seeger and H. Trauble, *Mechanics of Generalized Continua*, ed. E. Kröner, Springer Verlag, Berlin, 1968. p. 355.
30. E. S. P. Dash, M. J. Marcinkowski and R. W. Armstrong, *Phil. Mag.* **27**, 369, 1973.
31. Kovács I. (szerk.), *Magyar Fiz. Folyóirat*, **29**, 185, 287, 1981.
32. J. D. Eshelby, *Progr. Sol. Mech.* **2**, 89, 1961.
33. J. Weertman, *Phil. Mag.* **11**, 1217, 1965.
34. E. Kröner and B. K. Datta, *Z. Phys.* **196**, 203, 1966.
35. E. Kröner, *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, Vol. II., eds. J. A. Simmons et al., *Nat. Bur. Stand. (U. S.) Spec. Publ.* **317**, 1970. p. 729.
36. A. C. Eringen and D. G. Edelen, *Int. J. Eng. Sci.* **10**, 233, 1972.
37. A. C. Eringen, *Int. J. Eng. Sci.* **10**, 425, 1972.
38. A. C. Eringen, *Continuum Physics*, Vol. IV., Part III., Academic Press, New York, 1976.
39. A. C. Eringen, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10**, 671, 1977.
40. A. C. Eringen, *Int. J. Eng. Sci.* **15**, 177, 1977.
41. P. A. Flinn and A. A. Maradudin, *Ann. Phys.* **18**, 81, 1962.
42. H. W. King, *J. Mat. Sci.* **1**, 79, 1966.
43. A. H. Cottrell and B. A. Bilby, *Proc. Phys. Soc. A62*, 49, 1949.
44. A. C. Eringen, *Theory of Micropolar Elasticity, Fracture*, ed. H. Liebowitz, Academic Press, New York, Vol. 2., 1968. p. 621.
45. W. Nowacki, *Theory of Micropolar Elasticity*, Springer Verlag, Berlin, 1970.
46. A. C. Eringen, *Nonlocal Polar Field Theories*, *Continuum Physics*, Academic Press, New York, Vol. 4., 1976.
47. I. P. Nowacki, *Arch. Mech.* **19**, 531, 1977.
48. N. Sandru, *Int. J. Eng. Sci.*, **4**, 81, 1966.
49. G. Vörös and I. Kovács, *Int. J. Eng. Sci.*, **20**, 379, 1982.
50. A. C. Eringen, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **10**, 671, 1977.
51. V. R. Parfitt and A. C. Eringen, *Reflection of Plane Waves from the Flat Boundary of a Micropolar Elastic Halfspace*, No. 8—3. General Technology Corporation, 1966.

7. SZEMCSEHATÁR SZERKEZETEK GEOMETRIAI MODELLJEI

TASNÁDI PÉTER, JUHÁSZ ANDRÁS és FŐZY ISTVÁN.

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	427
2. Koincidencia típusú modellek	427
2.1. A koincidencia rács	427
2.2. A Bollmann-féle zéró rács	428
2.3. A teljes eltolódás rácsa	430
2.4. Összefüggés a CSL, OL és DSCL között	431
3. A Marcinkowski-féle egységesített határszerkezet modell	432
4. Ashby modell	434
5. Diskusszió	437
6. Összefoglalás	437
7. Függelék	438
8. Irodalom	438

1. BEVEZETÉS

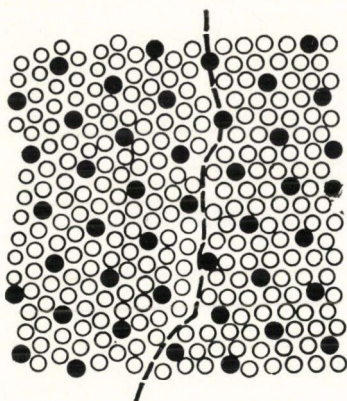
A szemcsehatárok adott típusú kristály ideális atomelrendezésű, de különböző orientációjú részeit elválasztó felületek. A szemcsehatárok általános esetben öt független adattal jellemezhetők, amelyek közül három a két kristályfél orientációkülönbségét, kettő pedig a határ síkját határozza meg. Az orientációkülönbséget egy (l , θ) adatpárral adhatjuk meg, ahol l az elforgatás tengelyét, θ pedig a szögét határozza meg.

A szemcsehatárok geometriai modelljei azon a feltevésen alapulnak, hogy a két kristályfél illeszkedése energetikailag akkor a legkedvezőbb, ha a határban sok olyan atom van, amely mindkét kristályfélhez pontosan illeszkedik.

2. KOINCIDENCIA TÍPUSÚ MODELLEK

2.1. A koincidencia rács

Forgassunk el egy tökéletes kristályt tetszőleges rácspontján átmenő tengely körül α szöggel és határozzuk meg az eredeti és az elforgatott kristály egybeeső rácspontjait. Ezek az egybeeső rácspontok alkotják az ún. koincidencia rácsot, továbbiakban CSL-t (coincidence site lattice). Az 1. ábra felületcentrált köbös (fcc) kristály szoros illeszkedésű síkját mutatja, amelyben az $[111]$ tengely körüli 38° -os elforgással képződött szemcsehatár van. Jól látható, hogy minden hetedik atom pontosan illeszkedik



1. ábra. $\Theta=38^\circ$ -os dőlt határ ($\Sigma=7$) szerkezete. A sötét pontok a koincidens rácshelyeket jelölik

mindkét kristályfélhez. A CSL jellemzésére általában az egybeeső rácshelyek sűrűségének Σ reciprokát használjuk [1, 2, 3].

Azonnal látható, hogy CSL csak speciális elforgatások esetén keletkezik. Köbös kristályok esetén a $[hkl]$ tengely körüli olyan Θ elforgatásoknál keletkezik CSL, amelyekre [1]

$$\Theta = 2 \arctg \frac{y}{x} \sqrt{N}, \quad (1)$$

ahol x és y tetszőleges egész számok, $N = h^2 + k^2 + l^2$. Ekkor

$$\Sigma = x^2 + Ny^2.$$

A koincidens rácssíkok nagy orientációkülönbségű tartományokat is elválaszthatnak, a koincidens határok ekkor speciális nagyszögű szemcsehatárok (pl. fcc rácspan az $[111]$ tengely körüli $73,2^\circ$ -os forgatáskor $\Sigma=19$ CSL keletkezik).

2.2. A Bollmann-féle zéró rács [4, 5]

A tapasztalat szerint a szemcsehatárok tetszőleges orientációkülönbségű tartományokat választhatnak el, így a diszkrét szögeltérések esetén létrejövő koincidens határok segítségével az általános nagyszögű szemcsehatárok szerkezete nem értelmezhető.

A CSL fogalmának általánosításaként Bollmann bevezette a zéró rács fogalmát, amelynek segítségével tetszőleges nagyszögű határok szerkezete is értelmezhető.

A Bollmann-féle zéró rács (O lattice), a továbbiakban OL , fogalmához a következőképpen juthatunk el. Az egyszerűség kedvéért korlátozódjunk most is a síkbeli esetre. Legyen pl. ez a sík az fcc rács egy (100) síkja, amelyen a rácspontok négyzetes elrendeződésűek. A rácspontok helyett azonban vizsgáljuk most az adott rácsot tartalmazó teljes sík elforgatásának eredményét. A Θ szöggel történő elforgatás síkbeli esetben az

$$A = \begin{pmatrix} \cos \Theta & \sin \Theta \\ -\sin \Theta & \cos \Theta \end{pmatrix} \quad (2)$$

mátrixszal jellemezhető, amely a sík r helyvektorú pontjait az

$$r' = Ar \quad (3)$$

pontokba viszi át. Soroljuk a teljes sík pontjait a rács segítségével osztályokba oly módon, hogy az egyes osztályokat az egyes cellák megfelelő pontjai alkossák. Megfelelő pontok azok, amelyek az egyes cellákon belül azonos helyzetűek, azaz ha az elemi cellákat fedésbe hozzuk, akkor az azonos osztályba tartozó belső pontok is fedésbe kerülnek. Tiszta köbös rács esetén a megfelelő pontokról azonnal megállapít-

ható, hogy koordinátáik tört részei megegyeznek (pl. a 3,2; 4,1) és (6,2; 4,1) koordinátájú pontok azonos osztályba tartoznak).

Az azonos osztályba tartozó pontok mindig olyan eltolással hozhatók fedésbe, ahol az eltolásvektor az eredeti rácshoz tartozik, vagyis az y pontok között mindig van olyan, amelyre teljesül, hogy

$$y = x + b,$$

ahol b az eredeti rács valamely rácsvektora. Ha $\det A \neq 0$ és $\det (E - A^{-1}) \neq 0$, (E az egységtenzor), akkor ezek a pontok az eredeti rács vektoraiból az

$$y = (E - A^{-1})^{-1} b \quad (4)$$

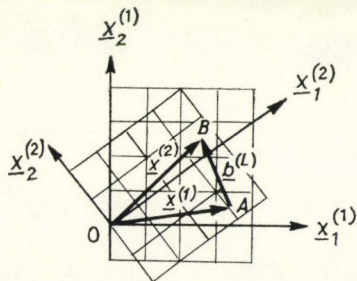
összefüggéssel határozhatók meg. Síkbeli példánkban

$$(E - A^{-1})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} \\ -\operatorname{ctg} \frac{\Theta}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

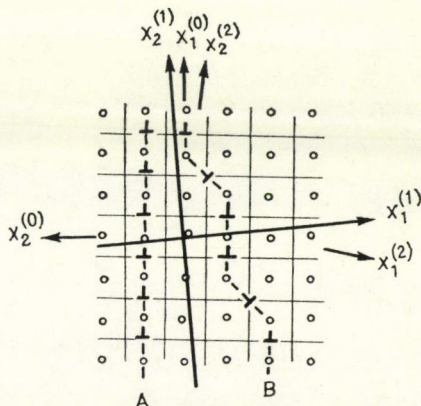
A (4) egyenlettel meghatározott pontok alkotják a zéró rácst. A OL pontjai tehát azok a pontok, amelyekben az eredeti és az elforgatott rács azonos helyzetű pontjai kerülnek fedésbe. (2 ábra). Speciális esetben természetesen rácpontok is egybeeshetnek, azaz ha létezik CSL , akkor az az OL egy alrácát képezi.

Az OL azonban a CSL -el szemben mindig létezik és folytonos függvénye az A transzformációnak, azaz az elforgatás szögének. Míg tehát az elfordulás szögének csekély megváltozása a koincidencia rács teljes eltűnéséhez vezet, a zéró rács helyzetét csak csekély mértékben változtatja meg.

Míthogy a zéró rács elemei a két rács megfelelő pontjainak egybeesésével jönnek létre, a határfelületeken elhelyezkedő O pontok a legjobb illeszkedésű, minimálisan



2. ábra. Síkbeli rács és elforgatottja. Az elforgatás után az „A” osztály elemei a „B” osztály elemeivel esnek egybe



3. ábra. Szemcsehatár meghatározása zéró rács segítségével. (Az üres körök a zéró rács pontjai, a diszlokációk a leginkább torzuló helyekre kerülnek.)

torzuló pontokat jelentik. Ennek megfelelően a legrosszabbul illeszkedő helyek az **O** pontokat összekötő szakaszok felezősíkjai. Meghúzva az összes szomszédos zéró pontokat összekötő szakaszok felezősíkjait, ismét egy cellás szerkezetet kapunk, amelyben minden cella egyetlen **O** pontot tartalmaz.

Bejelölve a szemcsehatár síkját és a határ két oldalán az atomok helyét, a határ és a zéró rács, illetve a körülötte kialakított cellahatárok metszéspontjai a legjobb, illetve a legrosszabb illeszkedésű helyeket jelölik ki. A legrosszabb illeszkedésű helyekre diszlokációkat iktatva meghatározható a határ szerkezete (3. ábra).

2.3. A teljes eltolódás rácsa [4, 5, 7]

A koincidens rácsok sok szempontból kitüntetett szereppel bírnak, hiszen ilyen rács létezése esetén a határ több-kevesebb atomja megőrzi eredeti helyét. A koincidens helyzettől csekély mértékben eltérő orientációjú rácsokat ezért célszerű a koincidens határra alapozva tárgyalni. Ahogyan a tökéletes kristályban a kisszögű határokat diszlokációkból építhetjük fel, ugyanígy hozhatunk létre a koincidens határokból megfelelő Burgers vektorú diszlokációk segítségével a koincidenstől kissé eltérő szögű határokat.

Ezeket a diszlokációkat, amelyek a határ koincidens orientációját konzerválják, szokás másodlagos (secondary) diszlokációknak nevezni. A másodlagos diszlokációk Burgers vektorai tehát abból a feltételből határozhatók meg, hogy ezek a diszlokációk az adott koincidens rácsképet nem változtatják.

A negyedik ábra fcc kristály [111] tengely körüli $21,8^\circ$ -os elforgatásakor keletkező csavart határ képét mutatja. Az egymáshoz képest elfordult szomszédos rács-síkok atomjait x-szel, ill. o-rel jelöltük, \mathbf{b}_1 , ill. \mathbf{b}_2 , a CSL-t „konzerváló” legrövidebb Burgers vektorokat jelöli. Ha bármelyik kristályrácsot ezen vektorok valamelyikével toljuk el a másikhoz képest, akkor a CSL eltolódik, de egyébként változatlan marad. Emiatt nevezzük az ilyen vektorokból felépített rácsot a teljes eltolódás rácsának, a továbbiakban DSCL-nek (displacement shift complete lattice). A DSCL Burgers

vektorai a 4. ábrán látható határ esetén az $\frac{a}{14} [12\bar{3}]$ vektorok.

A másodlagos diszlokációk helyének kijelölése olymódon történhet, hogy az adott orientációkülönbséghez is és az ehhez legközelebb eső koincidens orientációhoz is meg- szerkesztjük az OL_1 , illetve OL_2 zéró rácsot, majd képezzük a két zéró rács ún. másodlagos zéró rácsát ($OL^{(m)}$). Amennyiben az $OL_1 \mathbf{x}_1^0$ vektorait a **B** transzformációs mátrix viszi át az $OL_2 \mathbf{x}_2^0$ vektoraiba, akkor a zéró rácsképzési szabályainak megfelelően a másodlagos zéró rács pontjait az

$$\mathbf{x}_m^0 = (\mathbf{E} - \mathbf{B}^{-1})^{-1} \mathbf{x}^{(\text{DSCL})} \quad (6)$$

4. ábra. $21,8^\circ$ -os csavart határ. \mathbf{b}_1 , és \mathbf{b}_2 a DSCL alapvektorai. (o -rel és x-szel az egymáshoz képest elfordult szomszédos rács-síkok atomjait jelöltük)

egyenletet kielégítő vektorok alkotják.

A másodlagos diszlokációk helyét — a primer diszlokációkhoz hasonlóan —, a másod-

lagos zéró rács pontjait összekötő szakaszok felező merőlegesei jelölik ki. Ezeken a helyeken a DSCL alapvektorainak megfelelő Burgers vektorokkal rendelkező diszlokációkötegeket elhelyezve a pontosan koincidens orientációjú határ éppen a megfelelő mértékben torzul.

2.4. Összefüggés a CSL, OL és DSCL között [6]

Az előzőekben a szemcsehatár szerkezet létrehozására speciális pontrácsokat vezettünk be. Ezen rácsok kapcsolatrendszerének áttekintése egyszerűbbé válik, ha felírjuk az egyes rácsok algebrai definícióját. Ebből a célból Iwasaki nyomán bevezetjük a következő jelöléseket. Legyen A_1 az $\{e^{(1)}, e^{(2)}, e^{(3)}\}$ A_2 pedig az $\{f^{(1)}, f^{(2)}, f^{(3)}\}$ alapvektorokból felépíthető olyan rács, amely megfelel az eredeti, illetve az elforgatott kristályrácsnak, vagyis a A_2 rács alapvektorai egy A lineáris transzformáció segítségével nyerhetők a A_1 rács alapvektoraiból. Legyen továbbá A_c , A_0 , A_r és A_d rendre a A_1 , A_2 rácsok CSL-je, OL-je, redukált zéró rácsa (ROL) és DSCL-je. A függelékben található definíciók alapján nyilvánvaló, hogy minden rács egy véges bázisú Z modulus, ilymódon belátható, hogy

$$A_0 = A_1 \cap A_2 \quad (7)$$

és

$$A_d = A_1 \cup A_2 \quad (8)$$

vagyis, hogy a CSL a rácspontok azon legnagyobb halmaza, amely mind A_1 -hez, mind A_2 -höz hozzátartozik, míg A_d az a legkisebb halmaz, amely mind A_1 -et, mind A_2 -t tartalmazza.

Az OL-t, illetve ROL-t definíció szerint a

$$A_0 = \{x^{(0)} = (E - A^{-1})^{-1}x_1; x_1 \in A_1\}, \quad (9)$$

illetve

$$A_{r_i} = A_0 + A_i \quad (10)$$

összefüggésekkel adjuk meg.

Belátható továbbá, hogy az ROL mindig izomorf A_d egy alrácsával [18], tehát

$$A_{r_i} \cong A, \text{ ahol } A \in A_d. \quad (11)$$

A fenti általános definíciók és a csoportelmélet izomorfia tétele alapján [8] összefüggést állapíthatunk meg az egyes rácsok elemi celláinak térfogata között. E szerint ugyanis a A_d/A_1 , és A_2/A_c , illetve A_{r_i}/A és A_0/A_c faktorcsoportok izomorfak, azaz

$$A_d/A_1 \cong A_2/A_c \quad (12)$$

és

$$A_{r_i}/A \cong A_0/A_c. \quad (13)$$

Az utóbbi állítás bizonyításához fel kell használni, hogy

$$A_c = A_1 \cap A_0 = A_2 \cap A_0. \quad (14)$$

Ismeretes, hogy azoknak a parallelepipedonoknak a térfogata, melyeknek csúcsai rácspontok, megegyezik a parallelepipedon belsejébe eső rácspontok számával.

Amennyiben tehát Λ_α egy alárácsa a Λ_β rácsnak, akkor

$$\frac{V_\alpha}{V_\beta} = \text{ord } \Lambda_\alpha / \Lambda_\beta, \quad (15)$$

ahol V_β és V_α a Λ_β , ill. Λ_α rács elemi cellájának térfogata, $\text{ord } \Lambda_\alpha / \Lambda_\beta$ pedig a $\Lambda_\alpha / \Lambda_\beta$ faktorcsoporthoz tartozó elemek száma. (Az állítás azonnal következik, ha meggondoljuk, hogy a $\Lambda_\alpha / \Lambda_\beta$ faktorcsoporthoz tartozó elemek a Λ_β rács Λ_α szerinti mellékosztályai, a mellékosztályok száma viszont megegyezik a Λ_α rács elemi cellájába eső Λ_β -hoz tartozó rácsponthoz való viszonyával, hiszen egy mellékosztályt tetszőleges elemével reprezentálhatunk.)

Vezessük be a

$$\Sigma = \frac{V_c}{V_1} \quad (16)$$

és

$$\sigma = \frac{V_c}{V_0} \quad (17)$$

jelöléseket, ahol V_1 , V_0 , V_c rendre a Λ_1 , Λ_0 és Λ_c rácsok elemi cellájának a térfogata. (7) miatt

$$\Sigma = \text{ord } \Lambda_1 / \Lambda_c, \quad (18)$$

illetve

$$\sigma = \text{ord } \Lambda_0 / \Lambda_c. \quad (19)$$

A (4) és (5) ekvivalenciarelációk felhasználásával adódik, hogy

$$\Sigma = \frac{V_c}{V_1} = \frac{V_1}{V_d} = \frac{V_d}{V_{r_1}}, \quad (20)$$

illetve

$$\sigma = \frac{V_c}{V_0} = \frac{V_1}{V_{r_1}}. \quad (21)$$

(20)-ból azonnal leolvasható, hogy a 2.15-tel definiált érték megegyezik a koindens helyek sűrűségének reciprokéval, azaz Σ szokásos [1] definíciójával.

3. A MARCINKOWSKI-FÉLE EGYSÉGESÍTETT HATÁRSZERKEZET MODELL [7–14]

Marcinkowski és munkatársai lényegében a CSL-re alapozott határmodellt fejlesztették ki [7, 8, 9]. A modell alapfogolata az, hogy a szemcsehatár a szomszédos szemcsékből származó diszlokációkból építhető fel. A szomszédos szemcsékből származó \mathbf{b}_L^{1P} és \mathbf{b}_L^{2P} Burgers-vektorú diszlokációk a határban a

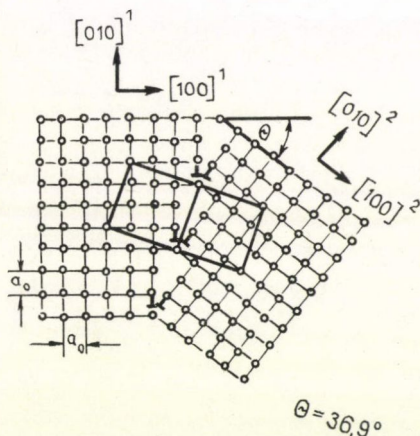
$$\mathbf{b}_{GB}^P = \mathbf{b}_L^{1P} + \mathbf{b}_L^{2P} \quad (22)$$

összefüggésnek megfelelően páronként egyetlen, \mathbf{b}_{GB}^P Burgers-vektorú szemcsehatár diszlokációból egyesülnek [7]. Az 5. ábra a fentieknek megfelelően létrejött határt

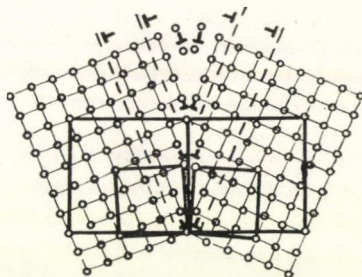
szemlélteti egy tiszta köbös rácsban. Az így keletkező határról megállapítható, hogy koincidens helyeket tartalmaz és a szemcsék közötti orientációkülönbség minden esetben a

$$\operatorname{tg} \frac{\Theta_c^p}{2} = \frac{N}{M} \quad (23)$$

egyenlettel jellemezhető, ahol N az adott csúszósíkon keletkező diszlokációk számát, M pedig a diszlokációk között elhelyezkedő rácssíkok számát jelenti. (Az ábrán $N=1$, $M=3$ és $\Theta_c^p=36,9^\circ$) A (23) egyenletnek megfelelő dőlésű határokhöz tartozó CSL-t Marcinkowski primer CSL-nek nevezte, erre utal az egyes mennyiségek mellett felső indexként elhelyezett p betű. Másodlagos (secondary) CSL-hez jutunk akkor, ha az elsődleges CSL-hez tartozó határt a primer diszlokációk csúszósíkjára merőleges csúszósíkokon mozgó diszlokációkkal tovább „döntjük”. A 6. ábrán olyan határ látható, amely az előző $N=1$, $M=3$ értékekkel jellemzett határból úgy keletkezett, hogy minden harmadik másodlagos csúszósíkon egy-egy rácsdiszlokációt vittünk a határba, s ezáltal a határ dőlés szöge $36,9^\circ$ -ról $43,1^\circ$ -ra nőtt.



5. ábra. $\Theta=36,9^\circ$ -os dőlt határ Marcinkowski-féle modellje. Mindkét szemcsében feltüntették a CSL elemi celláját



6. ábra. $\Theta=43,1^\circ$ -os dőlt határ Marcinkowski-féle modellje. Mindkét szemcsében feltüntették a primer és szekunder CSL elemi celláját

Megállapítható, hogy általában ha szemcsénként N primer diszlokációt és n szekunder diszlokációt viszünk be a rácsba úgy, hogy a primer diszlokációk M , a szekunder diszlokációk m rácssíknyi távolságban vannak egymástól, akkor a határ szögére teljesül a

$$\operatorname{tg} \frac{\Theta_c^s}{2} = \frac{2mN + Mn \sin \Theta_c^s}{2mN - Nn \sin \Theta_c^s} \quad (24)$$

összefüggés. Ezt az egyenletet azonban tetszőleges M , N , m , n esetén egzakt módon megoldani nem lehet, így közelítő megoldást kell keresnünk. Igen jó közelítést jelent pl. ha Θ_c^s jobb oldalán Θ_c^s helyére a legközelebbi primer koincidencia irányának megfelelő Θ_c^p szögét írjuk.

A fentiekben röviden vázolt gondolatmenet szimmetrikus dőlt határookra vonatkozik, minden nehézség nélkül kiterjeszthető azonban tetszőleges határookra is [11–13].

A Bollmann-féle zéró rács elmélet és a Marcinkowski által kifejlesztett modell közötti alapvető különbség az, hogy a Bollmann-elméletben a rácsdiszlokációk mellett a DSCL-beli Burgers-vektorral rendelkező másodlagos diszlokációk alakítják ki a határszerkezetét, a Marcinkowski modelljében pedig mind a primer, mind a szekunder diszlokációk rácsdiszlokációk. Marcinkowski azonban figyelembe veszi, hogy a rácsdiszlokációk a két kristályfélből különböző irányból érkeznek a szemcsehatárhoz.

4. ASHBY MODELL [15, 16]

A szemcsehatárok a kristályos felépítésű tartományoknál lazább szerkezetű részei az anyagnak. A határban az atomok között nagyobb méretű üregek is lehetnek, mint a szabályos szerkezetű kristályos részekben. Erre alapozva Ashby és munkatársai a folyadékok Bernal-féle modelljéhez hasonló egyszerű geometriai modellt fejlesztettek ki, amelyben a szemcsehatárok megfelelően egymáshoz illeszkedő poliéder alakú üregekből épülnek fel.

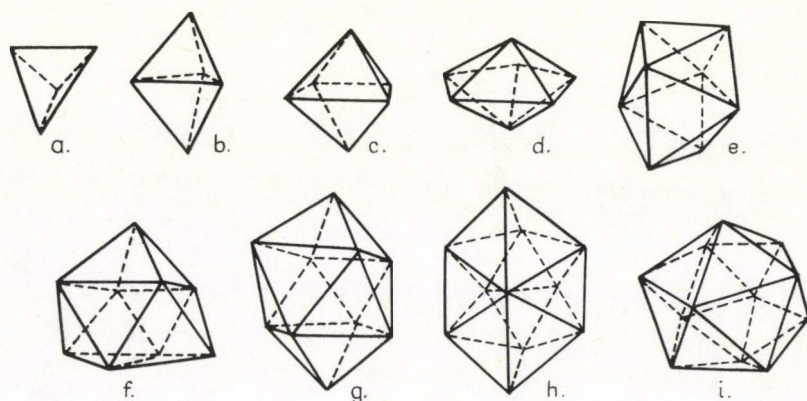
Megállapítható ugyanis, hogy a merev golyókból létrehozott szoros illeszkedésű szerkezetekben csak 8 különböző olyan poliéder alakú üreg jöhet létre, amelynek a belsejében nem fér el újabb golyó. Amennyiben tehát az atomokat merev gömböknek tekinthetjük, akkor mind a szabályos szerkezetű kristályos, mind pedig a szabálytalan szerkezetű határtartományokat fel kell tudnunk építeni ilyen poliéderekből.

Ezt a módszert először Bernal alkalmazta az egyszerű folyadékok szerkezetének leírására, s ő katalogizálta először a lehetséges üregek alakját is [17]. A Bernal-féle „kanonikus lyukak” Ashby módosításait is figyelembe vevő felsorolása az 1. táblázatban, rajzuk és szimmetria tulajdonságaik leírása pedig a 7. és 8. ábrán látható.

Az egyszerű fémek szabályos kristályai természetesen szintén felépíthetők a kanonikus lyukakból. Az fcc és a hexagonális kristályok tetraéderek és oktaéderek ren-

1. TÁBLÁZAT

Elnevezés	Csúcsok száma	Lapok száma	Ábra	Minimális csúcs középpont táv	Szimmetria
Tetraéder	4	4	a	0,61	$\sqrt{3}$ m köbös
Oktaéder	6	8	c	0,71	$\frac{\sqrt{2}}{2}$ m köbös
Ötszögű kettős piramis	7	10	d	0,61	$\frac{\sqrt{5}}{2}$ m 2 ötszöges
Négyszöges dodekaéder	8	12	e	0,68	$\frac{\sqrt{2}}{2}$ m négyszöges
„Sapkázott háromszöges prizma”	9	14	f	0,76	$\frac{\sqrt{3}}{2}$ m 2 hexagonális
Archimedes-féle antiprizma	10	16	g	0,82	8 mm négyszöges
Oktaedekaéder	11	18	h	0,74	2 mm ortorombos
Ikozaéder	12	20	i	0,95	5 3 2 ötszöges

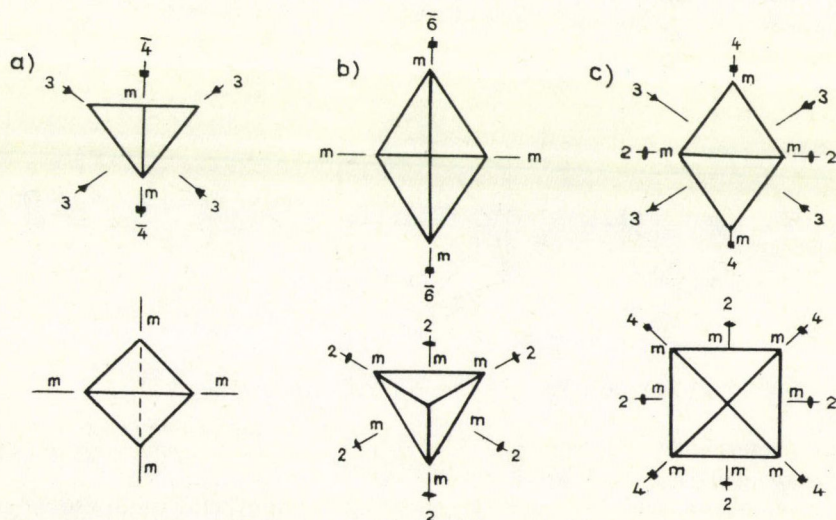


7. ábra. Az Ashby-féle poliéderek

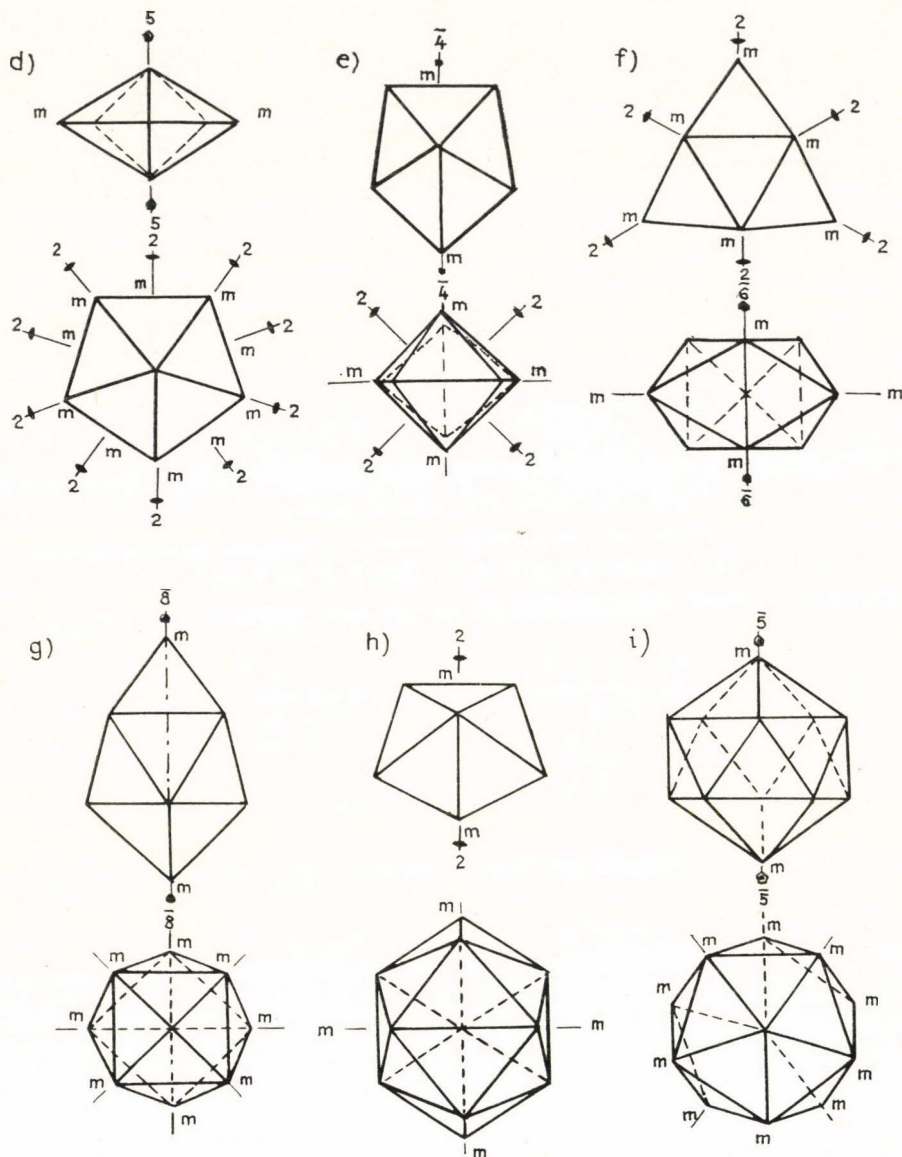
dezett sorozataként képzelhetők el, ahol a tetraéderek száma kétszerese az oktaéderek számának.

Azt, hogy a határok is felépíthetők a kanonikus lyukakból, Ashby makroszkópikus modelleken ellenőrizte grafikusan konstruált határszerkezetek, véletlen szoros illeszkedésű merev golyó modellek, buborékmodell, valamint Pond és Vitek [18] számítógépes eredményeinek a felhasználásával.

A modell legfőbb előnyét egyszerűsége és szemléletessége jelenti. Kvalitatív számításokban ez a modell jelenleg kevésbé használatos, mert a határt alkotó szerkezeti



8. ábra. Az Ashby-féle poliéderek szimmetriái



8. ábra. Az Ashby-féle poliéderek szimmetriái

egységek energia, illetve entrópiájárulékairól kevés becsléssel rendelkezünk. Hashimoto és munkatársai a $\Sigma=5$, $(0, 1, 3)$ és $\Sigma=11$, $(1, 1, 3)$ koincidens határok tulajdonságait vizsgálva megállapították, hogy az ötszögalapú kettős piramisokat tartalmazó határok jelentősen nagyobb entrópiatöbblettel rendelkeznek, mint az egyéb határok [19].

5. DISZKUSSZIÓ

A szemcsehatárok geometriai modelljei döntő többségükben a koincidens rács fogalmán alapulnak. A koincidenstől kissé eltérő orientáció esetén ezek a modellek lehetővé teszik a határszerkezet diszlokációkból való felépítését. Az általános nagyszögű határok esetén azonban a közelítés még geometriailag is igen bonyolulttá válik.

A modellek legkomolyabb hiányossága, hogy sem az Ashby modell, sem pedig a koincidens modellek esetén nem rendelkezünk általános érvényű és megbízható energiabecslési eljárással. Ilyen eljárás kifejlesztésére csak az utóbbi években tett kísérletet *Brokmann és Baluffi* [20].

Módszerük lényege a következő. Tetszőleges szemcsehatárt létrehozhatunk oly módon, hogy a határ síkja mentén a két merevnek képzelt kristályfelet koincidens orientációkülönbséggel egyesítjük, majd a határ atomjait megfelelő módon relaxáltatjuk. Ennek megfelelően a koincidens modellre alapozva egy tetszőleges határ energiáját az alábbi lépésekben határozhatjuk meg:

1. A koincidens orientációkülönbséggel egyesített merev kristályfelek egyesítésekor létrejött szerkezet E_R energiájának meghatározása (pl. Lenard—Jones vagy egyéb potenciálfüggvény segítségével).

2. Primer relaxáció a zéró rács elemeinek környezetében. Ebben a lépésben a határ energiája az orientációkülönbséggel folytonosan változó E_P értékkel csökken.

3. Másodlagos relaxáció. Nagy Σ értékek esetén a határban másodlagos szemcsehatár diszlokációk keletkeznek, s a határ szerkezete egy alacsony Σ' értékkel jellemezhető koincidens szerkezethez közeledik. Az E_S energiaváltozás ekkor mind Σ' , mind pedig az ennek megfelelő orientációkülönbségtől mért $\Delta\theta$ szögeltérés függvénye.

A teljes határenergiát az

$$E = E_R + E_P + E_S$$

összeg adja meg. *Brokmann és Baluffi* köbös kristályok [001] síkú csavart és dőlt határainak energiáját határozták meg. A számítások során az E_P és E_S tagok becslésére felhasználták a Read és Shockley által kisszögű szemcsehatárookra megadott összefüggést, amelyben szerepel a diszlokáciomagok energiája is. Ez utóbbi megfelelő becslésére azonban szintén nem rendelkezünk kielégítő eljárással.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

Az előzőekben röviden ismertettük a szemcsehatár szerkezetek geometriai modelljeit. Ezekben a modellekben a szemcsehatár szerkezetének meghatározása többnyire a koincidencia rács fogalmára épül. A koincidens határok kitüntetett szerepét az támasztja alá, hogy minimális energiájú határok valószínűleg akkor alakulnak ki, ha a határ atomjai mindkét kristályfélhez a lehető legjobban illeszkednek.

A geometriai modellek viszonylagos egyszerűségük és szemléletességük miatt könnyen kezelhetők, nem szabad azonban megfedkezünk arról, hogy ezekkel kapcsolatban megbízható energiabecslési eljárással nem rendelkezünk, ezért az így nyert eredményeket csak egyéb módszerekkel történő ellenőrzés után fogadhatjuk el.

FÜGGELÉK

NÉHÁNY CSOPORTELMÉLETI FOGALOM DEFINÍCIÓJA

1. Kommutatív gyűrű

Legyen értelmezve az A halmazon két művelet, amelyeket a továbbiakban nevezzünk összeadásnak és szorzásnak, és teljesüljenek a következő tulajdonságok:

- a) Az összeadásra vonatkozóan A alkotson kommutatív csoportot;
- b) A szorzás legyen asszociatív és kommutatív, valamint létezzen egységelem;
- c) Az összeadásra és szorzásra vonatkozóan teljesüljön mind a bal, mind a jobb oldali disztributivitás.

2. Z modulus

Legyen Z a pozitív egész számok gyűrűje. A Z feletti M modulus olyan kommutatív csoport, amelyre minden $a, b, \in Z$ és minden $x, y, \in M$ -re teljesül, hogy

$$(a+b)x = ax + bx$$

$$a(x+y) = ax + ay$$

Ha a Z modulus minden eleme előállítható M véges számú elemének — az ún. bázisnak — felhasználásával, akkor a modulust véges dimenziójúnak nevezzük.

A definíciókból azonnal látható, hogy tetszőleges kristályrács egy véges bázisú modulus, ahol a bázist az elemi rácsvektorok alkotják.

IRODALOM

1. S. Ranganathan, Acta Cryst. 21, 197, 1968.
2. D. G. Brandon, Acta Met. 14, 1479, 1966.
3. B. Ralph, R. C. Ecob, A. J. Porter, C. Y. Barlow and N. R. Ecob, Deformation of Polycrystals: Mechanismus and Microstructures, Eds. N. Hansen et al. 2 nd. Risø Internat. Symp. on Metallurgy and Mater Sci. 1981. p. 111.
4. W. Bollmann, Crystal Defects and Crystalline Interfaces, Springer-Verlag, Berlin, 1970.
5. D. A. Smith and R. C. Pond, Int. Met. Rev. 21, 61, 1976.
6. Y. Iwasaki, Acta Cryst. A32, 59, 1976.
7. H. Grimmer, W. Bollmann and D. H. Warrington, Acta Cryst. A30, 197, 1974.
8. M. J. Marcinkowski, K. Sadananda and Wen Feng Tseng, phys. stat. sol. (a), 17, 423, 1973.
9. M. J. Marcinkowski and K. Sadananda, phys. stat. sol. (a), 18, 361, 1973.
10. M. J. Marcinkowski and E. S. Dwarakadasa, phys. stat. sol. (a), 19, 597, 1973.
11. K. Sadananda and M. J. Marcinkowski, J. Appl. Phys. 45, 1521, 1974.
12. K. Sadananda and M. J. Marcinkowski, J. Appl. Phys. 45, 1533, 1974.
13. M. J. Marcinkowski and K. Sadananda, Acta Cryst. A31, 280, 1975.
14. M. J. Marcinkowski, phys. stat. sol. (a), 49, 725, 1978.
15. M. F. Ashby and F. Spaepen, Scripta Met. 12, 193, 1978.
16. M. F. Ashby, F. Spaepen and S. Williams, Acta Met. 26, 1647, 1978.
17. J. D. Bernal, Proc. R. Soc. A280, 299, 1964.
18. R. C. Pond and V. Vitek, Proc. Roy. Soc. Lond. A357, 453, 471, 1977.
19. M. Hashimoto, Y. Ishida, R. Yamamoto and M. Doyama, Acta Met. 29, 617, 1981.
20. A. Brokman and R. W. Baluffi, Acta Met. 29, 1703, 1981.
21. Sz. Leng, Algebra, Izd. Mir. Moszkva, 1968.

8. SZEMCSEHATÁR SZERKEZETEK FIZIKAI MODELLJEI

JUHÁSZ ANDRÁS, TASNÁDI PÉTER és FŐZY ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	439
2. Diszlokációs modellek	441
2.1. A kisszögű határok szerkezete	441
2.2. Szemcsehatár mint síkbeli diszlokációháló	442
2.3. Síkbeli periodikus diszlokációháló	442
2.4. Szemcsehatárok felületi diszlokációs modellje	445
2.4.1. A felületi diszlokációk fogalma	445
2.4.2. Szemcsehatárok energiájának meghatározása felületi diszlokációk segítségével ..	446
3. Szemcsehatárok folyadékmodellje	448
4. Szemcsehatárok kvantumtérelméleti leírása	449
5. Számítógépes szemcsehatár modellek	453
6. Összefoglalás	454
7. Függelék	455
8. Irodalom	456

1. BEVEZETÉS

A szemcsehatárok a polikristályos anyagok többé kevésbé tökéletes kristályrendű részeit (szemcséit) elválasztó, legfeljebb néhány atomátmérő vastagságú tartományok. Ezek a tartományok biztosítják az átmenetet a különböző módon orientált kristályszemcsék között.

A szemcsehatárok keletkezését legegyszerűbben úgy képzelhetjük el, hogy egy tökéletes kristályt egy sík mentén felvágva a két kristályfelet elforgatjuk egymáshoz képest, majd a kristályt ismét egyesítjük. Az elforgatás szöge megegyezik az eredetileg fedésben levő rácssíkok szögével, azaz a két szemcse orientációkülönbségét meghatározó szöggel.

A szemcsehatárokat az elforgatás tengelyének helyzete szerint osztályozhatjuk: *Csavart határról* beszélünk akkor, ha az elforgatás tengelye merőleges a határ síkjára. *Dőlt határról* beszélünk, ha az elforgatás tengelye a határ síkjába esik. *Általánosnak* nevezzük a *határt* akkor, ha az elforgatás tengelye nem egyezik meg az előzőkkel.

Szokásos a szemcsehatárok ún. kisszögű és nagyszögű csoportba sorolása is. Kisszögűnek nevezzük azokat a határokat, amelyek legfeljebb 5–8 orientációkülönbségű kristálytartományokat választanak el. Ezek a határok általában ún. szubszemcséket határolnak. Leírásuk sokkal egyszerűbb, mint a valódi szemcséket, azaz a nagy orientációkülönbségű tartományokat elválasztó határoké.

A fémek mechanikai tulajdonságait döntő mértékben befolyásolja a szemcse-szerkezet. A polikristályos anyagok folyáshatára, szakítószilárdsága, stb. lényegesen

eltér az egykristályokétól. A σ szakítószilárdság és a d átlagos szemcseméret között jó közelítéssel teljesül például a

$$\sigma = \sigma_0 + k d^{-1/2}$$

Hall—Petch reláció [1, 2]. A σ_0 és k anyagi paraméterek értékét a kristályszerkezet mellett a határ felépítése szabja meg. Ugyancsak függ a határ felépítésétől a szubszerkezet stabilitása is. Magas hőmérsékleten a fémek alakításában döntő szerepet kap a szemcsehatár csúszás [3]. A határ gyakran kiindulópontja az anyag töréséhez vezető repedések kialakulásának is. Ötvözetek esetén a szemcsehatárok különleges jelentőségűvé válhatnak azáltal, hogy az ötvözők diffúziója, esetleg szegregálódása a határban megy végbe [4]. A fémek felhasználhatósága szempontjából gyakran meghatározó szerepe van a szemcsehatárok fokozott korrózióérzékenységének.

A fenti korántsem teljes felsorolás is érthetővé teszi, hogy a szemcsehatárok szerkezetének vizsgálata a fémfizikai kutatások fontos területét képezi. A szemcsehatárok szerkezetéről azonban sokkal kevesebbet tudunk, mint magukról a kristályszerkezetekről. Ennek az az oka, hogy a kristályszemcsék belsejéről a diffrakciós mérések közvetlen információt adnak, azonban a határok kísérleti vizsgálatára nem áll rendelkezésünkre hasonlóan általános és megbízható módszer. A közvetlen, térion vagy elektronmikroszkópos szerkezetvizsgálatok ugyanis csak speciális esetekben alkalmazhatók. Emiatt a határok tulajdonságait sokszor szerkezeti modellek segítségével értelmezzük. A modell helyességének ezekben az esetekben szinte egyetlen kritériuma, hogy a polikristályos anyag makroszkopikus tulajdonságaira elméletileg adódó eredmények megegyezzenek a kísérleti tapasztalatokkal. Egységes, a szemcsehatárok tulajdonságait teljes általánosságban leíró modell azonban még nem született. Ennek az az oka, hogy az általános (kvantummechanikai, energiaminimum) elvekre épülő számítások a rendszer bonyolultsága miatt nem végezhetőek el kellő pontossággal, s a kísérleti vizsgálatok nehézségei miatt a félempirikus modellek kidolgozása is problémákba ütközik. Bár a szemcsehatár modellek felállítása során mindig igyekszünk eleget tenni annak az alapelvnek, hogy az adott orientációjú két szemcse közti határrétegben a minimális szabad energiával rendelkező atomelrendeződés valósuljon meg, a határmodellek többsége többnyire valamilyen egyéb elméletileg nem teljesen igazolt alapfeltevést is tartalmaz. Ezek az alapfeltevések általában geometriai jellegűek, s vagy a kristályszemcsék és a határ szabályos illeszkedésére (koincidens határok [5, 6]), vagy az atomok statisztikus rendjére [7, 8] vonatkoznak. A különböző feltevések alapjául elsősorban az atomok elrendeződését szimuláló makroszkopikus modellek (merev golyó modell, buborékmodell) szolgálnak [9]. A makroszkopikus modellekre az energiaminimum elv gyakran nehezen használható, helyette általánosan elfogadott eljárás a szabad térfogat minimalizálása [10]. A számítógépek elterjedésével igen széles körű vizsgálatok kezdődtek a határszerkezetek numerikus úton történő meghatározására is.

A jelen dolgozatban elsősorban a fizikai feltevések alapján nyugvó modellekkel foglalkozunk, a tisztán geometriai modelleket az előző dolgozatban tárgyaljuk.

2. DISZLOKÁCIÓS MODELLEK

A szemcsehatárok szerkezetének egyik legkézenfekvőbb magyarázatához jutunk, ha a határt diszlokációkötegekből állítjuk elő, mert ebben az esetben a határ tulajdonságainak magyarázata a diszlokációk jól kidolgozott elméletére alapozható. Ez az elképzelés legegyszerűbben és legnagyobb sikerrel a kisszőgű határok esetén alkalmazható, mivel a szomszédos szemcsék orientációkülönbsége ekkor még olyan kicsiny, hogy a határt alkotó diszlokációkról feltételezhető, hogy ugyanahhoz a kristályhoz tartoznak.

2.1. A kisszőgű határok szerkezete

Burgers klasszikus elképzelése szerint a két egymástól csak kevésbé eltérő helyzetű kristályszemcsét elválasztó határréteg egy síkban egymás fölé rendeződött diszlokációkból álló falként fogható fel. A két szemcse orientációkülönbségét jellemző Θ ($\Theta \ll 1$) szög a diszlokációk \mathbf{b} Burgers vektorával és az egymás felett elhelyezkedő diszlokációk h távolságával a

$$\Theta = \frac{b}{h} \quad (1)$$

alakban adható meg. Amennyiben az egymás fölött elhelyezkedő diszlokációk távolsága elegendően nagy, a diszlokációk kölcsönhatásától eltekinthetünk és a határ energiáját a határt felépítő diszlokációk energiájának összege adja.

Read és *Shockley* dőlt, kisszőgű határ egységnyi felületére jutó E energiát az egyes éldiszlokációk egységnyi hosszra jutó rugalmas energiájának és a diszlokációmag energiájának összegeként állították elő [11]. Számításaik eredményeként az

$$E = E_0 \Theta (A - \ln \Theta) \quad (2)$$

kifejezés adódott, ahol Θ a határ szöge, az E_0 és A állandók értéke pedig az anyagi minőségtől, a határ helyzetétől, a Burgers vektortól és a kristály rugalmas állandóitól függ.

A kisszőgű határok fenti modelljét a (2) összefüggés kísérleti ellenőrzésével vizsgálhatjuk. Ebből a célból azonban célszerű ezt az összefüggést kissé átalakítani. Megállapítható, hogy a (2) energiafüggvénynek a $\Theta^* = \exp(A-1)$ értéknél maximuma van, és

$$E_{\max} = E_0 \Theta^*. \quad (3)$$

Az energiakifejezést a maximális energiaértékkel normálva az

$$\frac{E}{E_{\max}} = \frac{\Theta}{\Theta^*} \left(1 - \ln \frac{\Theta}{\Theta^*} \right) \quad (4)$$

összefüggéshez jutunk. Látható, hogy az E és A anyagi paraméterek szerepét a könnyebben kezelhető E_{\max} és Θ^* vette át. További előnyt jelent, hogy a különböző anyagokra vonatkozó $\frac{E}{E_{\max}}$ értékeket $\frac{\Theta}{\Theta^*}$ függvényében ábrázolva mindaddig ugyanazt a görbét kapjuk, míg a határ szerkezete a Burgers-féle elképzeléssel közelíthető. Kísérleti tapasztalatok szerint ez az egyezés $\Theta < 15^\circ$ esetén jó közelítéssel teljesül.

2.2. Szemcsehatár mint síkbeli diszlokációháló

A kisszögű határok Read—Shockley-féle modelljében a határt síkban elhelyezkedő éldiszlokációkkal helyettesítettük. Kézenfekvőnek látszik, s az elektronmikroszkópos vizsgálatoknak sem mond ellent, ha feltételezzük, hogy a szemcsehatárok általában egy síkbeli diszlokációhálózattal írhatók le. A diszlokációhálós szemcsehatár modellek az utóbbi időben egyre inkább terjednek, mivel a diszlokációk kontinuumelmélete [12, 13] lehetővé teszi a feszültség és elmozdulástér pontos meghatározását. A modell alapján vizsgálhatók a diszlokációháló stabilitásának feltételei is, és mint-hogy a stabilis diszlokációelrendeződések többnyire megegyeznek a tisztán geometriai kritériumok alapján meghatározott hálók szerkezetével, ezért a diszlokációs modellek a geometriai határmodellek fizikai megalapozását is szolgáltatják. A számítások legfőbb nehézségét a diszlokációmagok energiájának figyelembevétele jelenti. Ennek az energiajárulékának a meghatározására általános módszer még nem született.

2.3. Síkbeli periodikus diszlokációháló

A diszlokációháló rugalmas deformáció terét matematikailag az α_{ij} diszlokációsűrűség tenzor segítségével adhatjuk meg. Az α_{ij} diszlokációsűrűség tenzort az

$$\int_{\Delta S} \alpha_{ij} n_i dS = b_j \quad (5)$$

és

$$\oint_C dn_j = b_j \quad (6)$$

összefüggésekkel definiáljuk, ahol ΔS a C görbe által határolt n normálisú felületelem, \mathbf{b} pedig a Burgers vektor. Felületi diszlokációeloszlás esetén célszerű az $\hat{\alpha}^{(S)}$ felületi diszlokációsűrűség tenzor bevezetése az

$$\hat{\alpha}(\mathbf{r}) = \hat{\alpha}^{(S)} \delta(x_3) \quad (7)$$

formulával, ahol $\delta(x_3)$ a Dirac-delta és a diszlokációk síkja megegyezik az (x_1, x_2) koordinátasíkkal.

Ha a diszlokációháló az (x_1, x_2) síkban egymástól azonos d távolságban elhelyezkedő, \mathbf{b} Burgers-vektorú végtelen hosszú egyenes diszlokációkból áll, akkor

$$\alpha_{ij}^{(S)} = g t_i b_j \sum_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i n g \mathbf{q}} \quad (8)$$

ahol \mathbf{q} az $x_1 x_2$ sík tetszőleges vektora, \mathbf{g} pedig a \mathbf{t} egységvektor irányú diszlokációvonalakból álló rács reciprokt vektora, amely merőleges \mathbf{t} -re és hossza d^{-1} [14]. Az átlagos diszlokációsűrűség az

$$\bar{\alpha}_{ij}^{(S)} = \lambda_i b_j \quad (9)$$

összefüggéssel adható meg, ahol $\lambda = \frac{t}{d}$.

m egymással párhuzamos diszlokációsereg esetén

$$\hat{\alpha} = \sum_{p=1}^m \hat{\alpha}^{(p)} \quad (10)$$

és

$$\bar{\alpha}_{ij}^{(S)} = \sum_{p=1}^m \lambda_i^{(p)} b_j^{(p)}. \quad (11)$$

A szemcsehatárok legjellemzőbb tulajdonsága a két kristályfél egymáshoz képesti elfordulása. A továbbiakban ennek az elfordulástérnek a meghatározásával foglalkozunk. Az \mathbf{a} egységvektorral megadott tengely körül véges szöggel történő elforgás a

$$\hat{\Theta} = e^{i\omega \mathbf{a} \mathbf{J}} \quad (12)$$

tenzorral jellemezhető (lásd függelék), ahol \mathbf{J} komponensei a következők:

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

A $\hat{\Theta}$ tenzor $\Theta_{[ij]}$ antiszimmetrikus része a

$$\Theta = \mathbf{a} \sin \omega \quad (14)$$

vektor segítségével a

$$\Theta_{[ij]} = \varepsilon_{ijk} \Theta_k \quad (15)$$

alakban képzelhető, ahol felhasználtuk az összegzési konvenciót.

A Θ vektor és a diszlokációsűrűség tenzor között Kröner [12] szerint fennáll a

$$\Delta \Theta_k = \varkappa_{kl,l} \quad (16)$$

összefüggés, ahol Δ a Laplace-operátor, a vessző utáni index x_l szerinti differenciálást jelöl és

$$\varkappa_{k,l} = \frac{1}{2} \alpha_{mm} \delta_{kl} - \alpha_{kl}.$$

Az (x_1, x_2) síkban elhelyezkedő diszlokációháló esetén a (16) egyenlet megoldása két tagból áll, amelyek közül az egyik egy zérus átlagú, az (x_1, x_2) síktól mért távolsággal exponenciálisan csökkenő amplitúdójú periodikus függvény, a másik pedig mindkét féltérben homogén, a határon

$$\Theta^{(0)} = -\alpha_{13}^{(S)}, \quad -\alpha_{23}^{(S)}, \quad \frac{1}{2} (\bar{\alpha}_{11}^{(S)} + \bar{\alpha}_{22}^{(S)}) \quad (17)$$

ugrással rendelkező függvény [15], ahol az S index a tenzor szimmetrikus részét jelöli.

A diszlokációsűrűség átlagára vonatkozóan fennáll továbbá az

$$\hat{\alpha} = \mathbf{n} \times e^{i\omega \mathbf{a} \mathbf{J}} \quad (18)$$

összefüggés is, ahol \mathbf{n} a háló síkjának normálvektora [12].

A Θ vektor ismeretében meghatározható a háló feszültség és elmozdulástere is. A feszültségtér Θ -hoz hasonlóan egy zérus átlagú exponenciálisan csökkenő, valamint egy mindkét féltérben homogén, de ellentétes előjelű $\hat{\sigma}_h$ tagból áll. A feszültségtérnek a határ síkjában ily módon $2\hat{\sigma}_h$ nagyságú ugrása van, amely az átlagos diszlokációs-sűrűséggel a

$$\sigma_h = 2\mu \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha}_{21}^{(S)} - v\bar{\alpha}_{12}^{(S)}}{1-v} & \frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{22}^{(S)} - \bar{\alpha}_{11}^{(S)}) & 0 \\ \frac{1}{2}(\bar{\alpha}_{22}^{(S)} - \bar{\alpha}_{11}^{(S)}) & \frac{\bar{\alpha}_{21}^{(S)} - \bar{\alpha}_{12}^{(S)}}{1-v} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (19)$$

alakban adható meg [14]. Ahhoz, hogy a háló egyensúlyban legyen, a $\hat{\sigma}_h$ feszültség-tenzornak el kell tűnnie. Ennek megfelelően vagy az

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{12}^{(S)} &= 0 \\ \bar{\alpha}_{21}^{(S)} &= 0 \\ \bar{\alpha}_{11}^{(S)} &= \bar{\alpha}_{22}^{(S)} \end{aligned} \quad (20)$$

összefüggéseknek kell teljesülniük, vagy több egymást kompenzáló feszültségterű diszlokációhálónak kell léteznie. (17) és (18)-ból azonnal látható, hogy kisszögű határok esetén ezek a feltételek automatikusan teljesülnek, mert ebben az esetben a Θ tenzornak csak a (15)-tel megadott antiszimmetrikus része különbözik zérustól. Nagyszögű szemcsehatárok esetén ezek a feltételek egyetlen diszlokációhálóra nem teljesíthetők.

A (10), (11), (17) és (19) összefüggéseket felhasználva a diszlokációhálóra és a szemcsék orientációkülönbségére vonatkozóan a következő feltételeket kapjuk:

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^m \lambda_1^{(p)} b_2^{(p)} &= 0 \\ \sum_{p=1}^m \lambda_2^{(p)} b_1^{(p)} &= 0 \\ \sum_{p=1}^m (\lambda_1^{(p)} b_1^{(p)} - \lambda_2^{(p)} b_2^{(p)}) &= 0 \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \sum_{p=1}^m \lambda_2^{(p)} b_3^{(p)} &= -\Theta_1 \\ \sum_{p=1}^m \lambda_2^{(p)} b_3^{(p)} &= -\Theta_2 \end{aligned} \quad (22)$$

$$\sum_{p=1}^m [\lambda_1^{(p)} b_1^{(p)} + \lambda_2^{(p)} b_2^{(p)}] = 2\Theta_3.$$

A (21) és (22) egyenletekben λ paraméterként kezelhető és elektronmikroszkópos vizsgálatokkal viszonylag egyszerűen meghatározható. Ha a hálót egyetlen diszlokáció-

sereg alkotja, ($m=1$) akkor az egyenletrendszer egyetlen lehetséges megoldásaként a kisszőgű dőlt határ adódik, amelyre

$$\lambda_1 b_3 = -\Theta_1, \quad (23)$$

\mathbf{b} és λ többi komponensei zérussal egyenlők.

Ha $m=2$ és a két diszlokációsereg nem párhuzamos egymással, azaz

$$\lambda^{(1)} \times \lambda^{(2)} \neq 0, \quad (24)$$

akkor a (21), (22) egyenletrendszerből \mathbf{b}_1 és \mathbf{b}_2 egyértelműen meghatározható:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^{(1)} &= \frac{1}{|\lambda^{(1)} \times \lambda^{(2)}|} (\lambda^{(2)} \times \Theta) \\ \mathbf{b}^{(2)} &= \frac{1}{|\lambda^{(1)} \times \lambda^{(2)}|} (\lambda^{(1)} \times \Theta). \end{aligned} \quad (25)$$

Három diszlokációsereg esetén a Burgers-vektorok nem határozhatók meg egyértelműen, a (21) és (22) egyenletekből azonban adódik néhány olyan feltétel, amely a krisztallográfiai adatokkal együtt megkönnyíti a diszlokációháló elektronmikroszkópos azonosítását [15].

A fentiekben vázolt és csak igen egyszerű esetekre részletezett számítások minden további nélkül alkalmazhatók bonyolultabb diszlokációháló (méhsejt szerkezet [15], „zig-zag” diszlokációk [14] esetén is, a számítások azonban igen bonyolulttá válnak.

Lényegében hasonló elvi alapon határozzák meg a szemcsehatárok szerkezetét *Marcinkowski és munkatársai* is [16, 17]. A szemcsehatárokat két diszlokációháló segítségével modellezzik, amelyek ún. primer és szekunder csúszósíkokon mozogva jutnak a határba. A közelítés azonban kifejezetten geometriai jellegű, ezért itt nem részletezzük.

2.4. Szemcsehatárok felületi diszlokációs modellje

2.4.1. A felületi diszlokációk fogalma

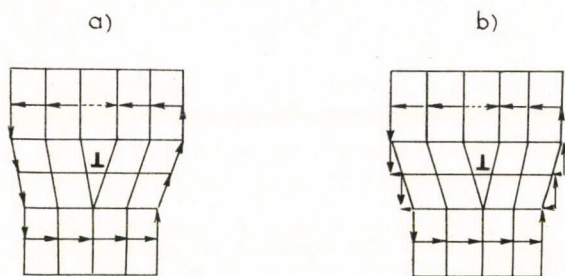
A diszlokációs modelleken alapuló számítások általában végtelen kiterjedésű közegre vonatkoznak, mert ez a feltevés egyszerűbbé teszi a probléma matematikai kezelését. A véges közegre vonatkozó számítások egyrészt nagyon bonyolultak, másrészt elvileg is problematikusak [18].

Marcinkowski a véges közegek deformációs állapotának meghatározására sajátos módszert dolgozott ki [19, 20]. A határfeltételek kielégítésére bevezette az ún. felületi diszlokációk fogalmát. A felületi diszlokációk bevezetésével egy a kristály határfelületét metsző Burgers körre vonatkozóan definíció szerint teljesülnie kell a

$$\sum_i \mathbf{b}_i + \sum_j \mathbf{b}_j^s = 0$$

összefüggésnek, ahol $\sum_i \mathbf{b}_i$ a kristályban levő valódi diszlokációk Burgers vektorainak összege, $\sum_j \mathbf{b}_j^s$ pedig a felületen elosztva elhelyezkedő infinitezimális felületi diszlokációk Burgers vektorainak összege.

A posztulátumként kimondott Burgers-vektor megmaradás előnye érthetővé válnak, ha kissé részletesebben vizsgálunk pl. egy olyan kristályt, amelyben egyetlen éldiszlókáció helyezkedik el. Helyezzünk el először egy éldiszlókációt egy végtelen kristályban. A diszlókáció által keltett torzulás a kristály végtelen távolinak tekintett határfelületén zérussá válik. Amennyiben azonban a diszlókációt véges környezetével együtt kiemeljük az anyagból, akkor a kristálydarab eredeti állapotát csak úgy tarthatjuk fenn, ha a határfelületen megfelelő külső feszültségeket működtetünk. Külső feszültségek nélkül a kristály relaxált állapotba kerül. A feszültségmentes állapot könnyen leírható, ha az anyag belsejében elhelyezkedő diszlókáció mellett a felületen elemi diszlókációkat tételezünk fel, amelyek Burgers vektorának összege éppen kompenzálja a belső diszlókáció Burgers vektorát (1. ábra). Megfelelő eloszlású felületi diszlókációk felvételével egyszerűbben és fizikailag megalapozottabban kezelhetők pl. azok a problémák, amelyek a képdiszlókációk módszerével voltak megoldhatók [18].



1. ábra. a) Rácsdiszlókáció a köré írt Burgers körrel, b) Rácsdiszlókáció és az azt kompenzáló felületi diszlókációk

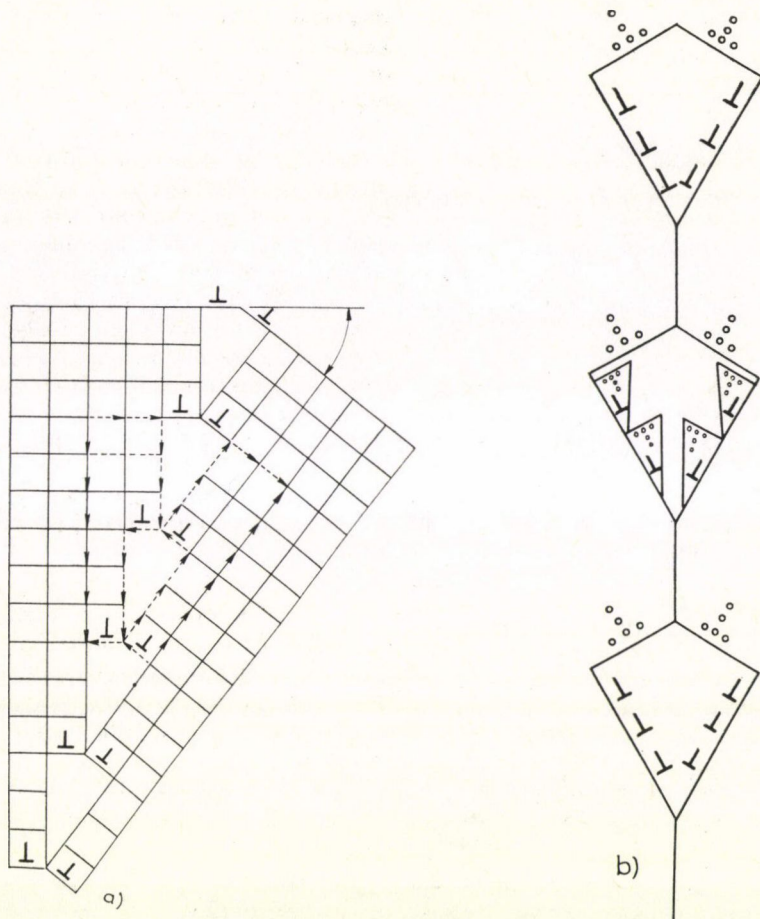
2.4.2. Szemcsehatárok energiájának meghatározása felületi diszlókációk segítségével

A dőlt határok létrejöttét úgy képzelhetjük el, hogy a kristályt egy sík mentén felvágjuk, majd a két kristályfelet mereven elforgatjuk. Ennek következtében természetesen üregek, ill. erősen összenyomott tartományok keletkeznek az anyagban. Megfelelően elhelyezkedő és elegendően nagy üregek keletkezése esetén mindkét kristályfél deformációmentes maradhat és rugalmas feszültségek sem keletkeznek. Ekkor azonban az üregek belső felülete igen nagy s így a határ keletkezésekor fellépő felületi energia járulék is nagy. Ha a határ egyes részein az elfordult kristályfelek egymásba hatolva összekapcsolódnak, akkor az üregek felülete és a felületi energia járulék is csökken. Ugyanakkor az összezáruló határ mentén nagy deformációk és emiatt nagy belső feszültségek keletkeznek, ezért nő a határ energiája. Ennek megfelelően a határ egységnyi felületére jutó energia az

$$E = E_D + E_K + E_F$$

tagokból áll, ahol E_D a határt alkotó felületi és kristálydiszlókációk energiája, E_K a diszlókációk kölcsönhatási energiája E_F , pedig a felületi energia [21, 22].

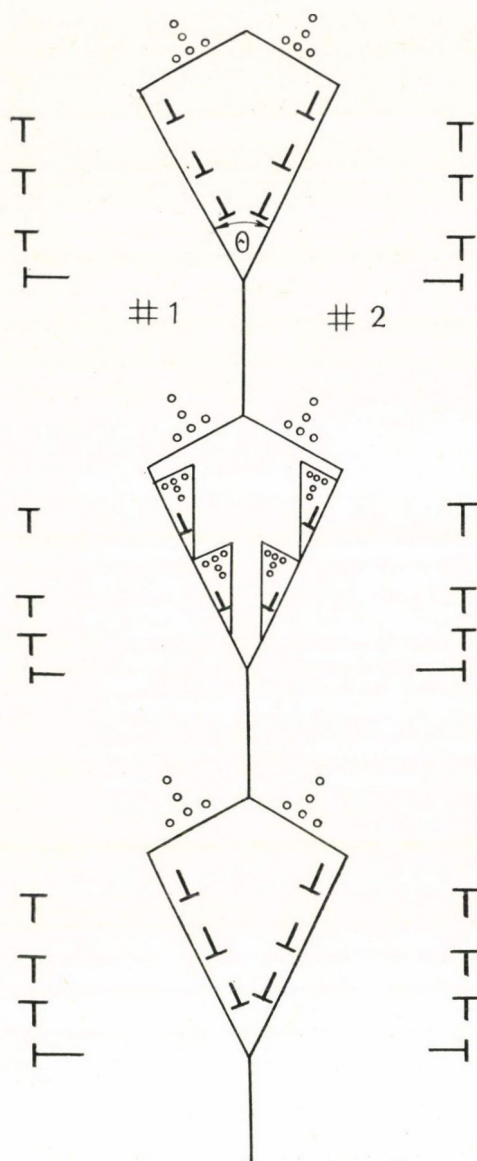
Adott orientációkülönbségű szemcsékhez a határt felépítő diszlókációk eloszlása geometriai kritériumok alapján határozható meg, a határ energiája pedig a



2. ábra. a) Üregekből álló határ képe.
b) Összeczárult szakaszokból és üregekből álló határ képe

szokásos kontinuum közelítés alkalmazásával számítható ki. A 2. ábrán egy üregek-
ből, ill. periodikusan összeczárult szakaszokból és üregekből álló határ sematikus képe
látható. Az üregek felületén a feszültségmentességet felületi diszlokációk, a határ
hosszútávú feszültségterének árnyékolását pedig egy feltételezett másodlagos disz-
lokációháló biztosítja [21]. Adott határszög esetén a határenergia minimális értéke
meghatározható az árnyékoló diszlokáció hálóhelyének függvényében (3. ábra). Ez a
minimális energiájú diszlokációelrendeződés tekinthető a határ tényleges szerkezeté-
nek. Megjegyezzük, hogy a konkrét számítások csak közelítőleg és gépi úton végez-
hetők el, a kapott eredmény konzisztens a korábban kapott elméleti és kísérleti ered-
ményekkel [21].

A szemcsehatárok felületi diszlokációs modellje fizikailag egységes szemléletű
és teljes általánosságban használható. A megfelelően választott felületi és árnyékoló



3. ábra. Szemcsehatár és a feszültség teret árnyékoló diszlokációháló

diszlokációrendszerek segítségével a határ közelében helyesen kapjuk az atomok elrendeződését és jól értelmezhetők az elektronmikroszkópos felvételek is.

Az így végzett számítások azonban természetesen magukban hordozzák a kontinuum közelítésből származó hibákat, tehát nem vehető figyelembe sem a diszlokációmag hatása, sem pedig a nagy deformációknál fellépő nemlineáris effektus. További, véleményünk szerint elvi jelentőségű hibát okoz az, hogy a felületi diszlokációk energiáját a szerzők a végtelen közegben elhelyezkedő diszlokációkra vonatkozó energiakifejezéssel közelítik.

3. SZEMCSEHATÁROK FOLYADÉKMODELLJE

Az előző fejezetben tárgyalt diszlokációs modellek elvileg tetszőleges orientációkülönbség esetén alkalmazhatók, de a számítások bonyolultsága miatt többnyire csak kisszögű, ill. speciális nagyszögű határookra adnak gyakorlatilag is használható eredményt.

Az általános nagyszögű határok fontosabb tulajdonságai az alábbiakban foglalhatók össze:

- a) az energiájuk független az orientációtól [23],
- b) a határenergia a folyadékok felületi feszültségéhez hasonlóan lineáris hőmérsékletfüggést mutat [24],
- c) a határmozgékonyosság nagy [25],
- d) az olvadáspont közelében végbe menő deformációs folyamatokban alapvető szerepet játszik a szemcsehatárcsúszás, amelynek során a szemcsék alakváltozás nélkül, szinte akadálytalanul csúsznak el egymáson határaik mentén [26].

A felsorolt tulajdonságok viszonylag jól magyarázhatók a termodinamikai alapon nyugvó folyadékmodell segítségével. Eszerint a két szomszédos szemcse közötti tartományt mindkét kristályféllel jól illeszkedő folyadékfilm alkotja. Bár az olvadáspont alá hűtött folyadékállapot termodinamikailag instabil, a két egymáshoz kedvezőtlenül

illeszkedő kristályból álló rendszer szabadenergiája csökkenhet a közöttük létrejövő folyadékfilm hatására. A szemcsehatárok atomszerkezete e szerint a túlhűtött olvadékok üvegszerkezetéhez hasonló.

A folyadékmodell alapján a szemcsehatárok a kristály szabadenergiáját

$$F(T) = \Delta u - T\Delta S$$

értékkel növelik. A Δu belső energia-növekményt elsősorban az atomi kötések energiája, a határ egységnyi felületére jutó atomok száma, valamint a koordinációs szám szabja meg. Folyadékszerkezet esetén a koordináció kristályos állapothoz képest lecsökken, ennek következtében a belső energia jelentősen megnő. Ezt az energia-növekményt azonban a $T\Delta S$ tag a hőmérséklet növekedésével egyre inkább kompenzálja. Ebben a tagban ΔS jó közelítéssel a konfigurációs entrópiával azonosítható, és a $Q = Lm$ olvadáshő és az olvadási hőmérséklet hányadosával közelíthető. Mint-hogy az olvadásponton a határ és a kristály szerkezete közötti különbség megszűnik, $F(T_0)$ is zérussá válik. Ezt felhasználva a szemcsehatár energiája tetszőleges T hőmérsékleten az

$$F(T) = \frac{mL}{T_0} (T_0 - T)$$

összefüggéssel becsülhető meg. Az ebből kapott energiaértékek azonban csak tájékoztató jellegűek, s erősen függnek a szemcsehatár vastagságától, amely igen nehezen becsülhető. Arany esetén például a 16,1 g/cal olvadáshő felhasználásával, valamint feltételezve, hogy a határ vastagsága 5–10 atomátmérő (20Å), és hogy a határ sűrűsége közelítőleg egyenlő a kristályos szerkezetű anyag sűrűségével, a fajlagos energiára 505 erg/cm² adódik. Mérések szerint 800 °C-on az átlagos szemcsehatárenergia 600 erg/cm².

A fentiekben tárgyalt teljesen fonomenologikus leírás mellett a folyadékmodell lehetővé teszi a szemcsehatárok atomelrendeződésének meghatározását is. Bernal [27] egyszerű modellt dolgozott ki az olvadásponthoz közeli hőmérsékletű folyadékok szerkezetének magyarázatára. Bernal modelljét Ashby alkalmazta a szemcsehatárok szerkezetének értelmezésére [8]. A Bernal modell alkalmas az üvegfémek szerkezetének leírására is [28]. Ennek alapján a fémüvegek a nagyszögű szemcsehatárok háromdimenziós megfelelőinek tekinthetők [29]. A Bernal modell szerint a folyadékok merev golyókból álló véletlen szoros illeszkedésű szerkezettel rendelkeznek, azaz atomjaik anélkül épülnek a lehető legszorosabban egymás mellé, hogy kristályos rend alakulna ki.

4. SZEMCSEHATÁROK KVANTUMTÉRELMELETI LEÍRÁSA

Vadati [30] a nagyenergiájú fizikában a kiterjedt objektumokra kifejlesztett kvantumtérelméleti módszerek segítségével adta meg a kristályhibák, közöttük a szemcsehatárok elméleti leírását.

A klasszikusan viselkedő kiterjedt objektumok (kristályhibák) kvantummechanikailag bozonkondenzáció útján jönnek létre. A kollektív módusba kondenzálódott bozonok klasszikus viselkedése intuitíve érthető, hiszen ha hN a bozonok kvantumszáma, akkor nagy N -nek esetén $\frac{h\Delta N}{hN} = \frac{\Delta N}{N}$ olyan kicsinnyé válik, hogy a rend-

szer már klasszikusan viselkedik. A kondenzáció folyamata matematikailag a bozon-transzformáció segítségével formulázható. A keletkezett makroszkópikus objektumok az $u_j(x)$ elmozdulástérrel írhatók le, amelyre teljesülnie kell a

$$\sum_{j=1}^3 A_{ij}(\partial) u_j(x) = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (26)$$

egyenletnek [30], amelyben

$$A_{ij}(\partial) = -\varrho_{ij}(-i\nabla) \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \sum_{l,m} C_{ij}^{lm}(-i\nabla) \nabla_l \nabla_m, \quad (27)$$

ahol ϱ_{ij} a sűrűségtenzor, a C_{ij}^{lm} értékek pedig állandók. A (26) egyenlet $u(x)$ -ben egy és többértékű megoldásokkal rendelkezik, azonban a $\partial_\mu u_i(x)$ gradiensnek többértékű megoldások esetén is egyértékűnek kell lennie.

Amennyiben az $u_i(x)$ függvény többértékű, akkor topológiailag a

$$G_{\mu\nu}^{+(i)}(x) = (\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) u_i(x) \quad (28)$$

függvénnyel jellemezhető, amelyre nyilvánvalóan teljesül a

$$G_{\mu\nu}^{+(i)} = -G_{\nu\mu}^{+(i)} \quad (29)$$

összefüggés. Az $u_i(x)$ függvény topológiai szingularitásai azok a tartományok, amelyekben a \tilde{G}^+ mátrix nem zérus elemekkel is rendelkezik. Bevezetve a

$$C_{ij}^{00}(\partial) = -\varrho_{ij}(i\nabla), \quad C_{ij}^{lm}(\partial) = C_{ij}^{lm}(-i\nabla), \quad C_{ij}^{l0}(\partial) = C_{ij}^{0l}(\partial) = 0 \quad (30)$$

jelöléseket, a A_{ij} -t meghatározó (27) kifejezés a

$$A_{ij}(\partial) = \sum_{\mu,\nu} C_{ij}^{\mu\nu}(\partial) \partial_\mu \partial_\nu \quad (31)$$

alakra egyszerűsödik. Alkalmazzuk A_{ij} -t a (28) egyenletre, valamint használjuk fel a $\partial_\mu u_i(x)$ egyértékűségéből adódó

$$(\partial_\mu \partial_\nu - \partial_\nu \partial_\mu) \partial_\mu u_i(x) = 0 \quad (32)$$

összefüggést, akkor a

$$\sum_j A_{ij}(\partial) \partial_\nu u_j(x) = \sum_j \sum_{\lambda,\mu} C_{ij}^{\lambda\mu}(\partial) \partial_\lambda G_{\mu\nu}^{+(j)}(x) \quad (33)$$

egyenlethez jutunk, amely a

$$\sum_j A_{ij}(\partial) \Delta_{jk}(x) = \delta_{ik} \delta^{(4)}(x) \quad (34)$$

összefüggéssel definiált Δ_{jk} Green-függvény felhasználásával a

$$\partial_\nu u_j(x) = \sum_{k,l} \sum_{\lambda,\varrho} \int d^4 x' \Delta_{jk}(x-x') C_{kl}^{\lambda\varrho}(\partial') \partial'_\lambda G_{\varrho\nu}^{+(l)}(x') \quad (35)$$

alakban integrálható.

A \tilde{G}^+ mátrix explicit meghatározására célszerű bevezetni a \tilde{G}^+ mátrix

$$G_{\mu\nu}^{(j)}(x) = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu}^{\lambda\varrho} \tilde{G}_{\lambda\varrho}^{+(j)}(x) \quad (36)$$

egyenlettel definiált duális konjugáltját. Ebből az egyenletből a Levi—Civita szimbólum és a Kronecker delta közötti

$$\varepsilon_{\mu\nu}^{\lambda\varrho} \varepsilon_{\lambda\varrho}^{\alpha\beta} = 2(\delta_{\mu}^{\beta} \delta_{\nu}^{\alpha} - \delta_{\mu}^{\alpha} \delta_{\nu}^{\beta}) \quad (37)$$

összefüggés segítségével a \tilde{G}^+ mátrix a

$$G_{\mu\nu}^{+(j)}(x) = -\frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu}^{\lambda\varrho} G_{\lambda\varrho}^{(j)}(x) \quad (38)$$

alakban fejezhető ki. Könnyen belátható, hogy a G mátrix divergenciamentes, azaz

$$\partial^{\mu} G_{\mu\nu}^{(j)}(x) = 0. \quad (39)$$

Ha egy adott rácshiba esetén ismerjük a \tilde{G} mátrixot, akkor a (35) és (36) összefüggésekből a megfelelő elmozdulástér már meghatározható. A következőkben a szemcsehatárokhoz tartozó G mátrixot határozzuk meg.

A szemcsehatárok felületmenti szingularitások. A négydimenziós térben a felületek egyenletét paraméteres alakban $y_{\mu} = y_{\mu}(\tau, \sigma_1, \sigma_2)$ függvényekkel adhatjuk meg, ahol τ az időparaméter. Egy adott $y_{\mu}(\tau, \sigma_1, \sigma_2)$ felületen létező szingularitás a

$$G_{\mu\nu}^{(i)}(x) = \sum_{\beta} M^{i\beta} \iiint d\tau d\sigma_1 d\sigma_2 \frac{\partial[y_{\mu}, y_{\nu}, y_{\beta}]}{\partial[\tau, \sigma_1, \sigma_2]} \delta^{(4)}(x-y)(\tau, \sigma_1, \sigma_2) \quad (40)$$

mátrixszal jellemezhető, ahol $M^{i\beta}$ a szingularitás erőssége

$$\frac{\partial[y_{\mu}, y_{\nu}, y_{\beta}]}{\partial[\tau, \sigma_1, \sigma_2]}$$

pedig az integráláskor alkalmazott transzformáció Jacobi determinánsa.

Megjegyezzük, hogy ha az $y_{\mu}(\tau, \sigma_1, \sigma_2)$ felület végtelen kiterjedésű, akkor a (40) összefüggés automatikusan kielégíti a G divergenciájára vonatkozó (39) feltételt. Amennyiben a felület zárt, akkor a G mátrix nem szemcsehatárt, hanem egyéb térfogati hibát jellemez. Ezzel a problémával azonban most nem foglalkozunk.

Statikus esetben a (40) összefüggés nagymértékben egyszerűsíthető, mert akkor

$$M^{i0} = 0, \quad y_0(\tau, \sigma_1, \sigma_2) = \tau, \quad y_i(\tau, \sigma_1, \sigma_2) = y_i(\sigma_1, \sigma_2) \quad (41)$$

és a G mátrix nem eltűnő komponensei a

$$G_{0k}^{(j)}(x) = \sum_l M^{jl} \iint d\sigma_1 d\sigma_2 \frac{\partial[y_k, y_l]}{\partial[\sigma_1, \sigma_2]} \delta^{(3)}(\mathbf{x}-\mathbf{y}(\sigma_1, \sigma_2)) \quad (42)$$

kifejezéssel adhatók meg. Megfelelő $x = x(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ koordináták bevezetésével elérhető, hogy az adott $y(\sigma_1, \sigma_2)$ felület a $\xi_3=0$ koordinátafelülettel essen egybe. Ekkor

$$G_{0k}^{(j)}(x) = \sum_l M^{jl} \frac{\partial[x_k, x_l]}{\partial[\xi_1, \xi_2]} \frac{\partial[\xi_1, \xi_2, \xi_3]}{\partial[x_1, x_2, x_3]} \delta(\xi_3). \quad (43)$$

Fektessünk a $\xi_3=0$ felületen fekvő P és Q pontokon keresztül egy C zárt görbét, amelynek egyik része a felület egyik, másik része a felület másik oldalára esik. A

$$B^l \equiv \oint_C ds_k \partial_k u_l(x) \quad (44)$$

integrál a PQ szakaszra jutó Burgers-vektorok összegét adja. Ez az összeg a G mátrix segítségével és a Stokes-tétel felhasználásával a

$$\oint_C dS_k \partial_k u_l(x) = \int_S dS_{ij} G_{ij}^{+ (l)}(x) = \int_S dS_k G_{0k}^{(l)}(x) \quad (45)$$

alakban is kifejezhető, ahol S a C görbe által határolt terület és

$$dS_{ij} = \frac{1}{2} dx_i \times dx_j \quad (46)$$

$$dS_k = \varepsilon_{kij} \left(\frac{\partial x_i}{\partial \xi_1} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_3} d\xi_1 d\xi_3 + \frac{\partial x_i}{\partial \xi_2} \frac{\partial x_j}{\partial \xi_3} d\xi_2 d\xi_3 \right). \quad (47)$$

(43)-ba beírva a G mátrix (42) alakját (45) és (46) figyelembevételével adódik, hogy

$$\begin{aligned} B^j &= \sum_l M^{jl} \int_S \left[\frac{\partial x_l}{\partial \xi_2} d\xi_2 d\xi_3 + \frac{\partial x_l}{\partial \xi_1} d\xi_1 d\xi_3 \right] \delta(\xi_3) = \\ &= \sum_l M^{jl} \int_Q^P \left(\frac{\partial x_l}{\partial \xi_2} d\xi_2 + \frac{\partial x_l}{\partial \xi_1} d\xi_1 \right) = \sum_l M^{jl} V_l, \end{aligned} \quad (48)$$

ahol V_l a Q -ból P -be mutató vektor. Az M mátrix a szomszédos A és B kristályszemcsék orientációkülönbségét jellemzi, tehát az A és B szemcséknek a referenciakristályhoz képest vett $\omega_A = \Theta_A \mathbf{a}^A$ és $\omega_B = \Theta_B \mathbf{a}^B$ elfordulásából állítható elő. Itt Θ_A és Θ_B az A , ill. B kristály elfordulási szöge \mathbf{a}^A és \mathbf{a}^B pedig a megfelelő forgástengelyek irányába mutató egységvektorok.

A szemcsehatáron fekvő P és Q pontokat összekötő \mathbf{V} vektornak a két kristályfél elfordulása következtében létrejövő \mathbf{u}^A és \mathbf{u}^B elmozdulása rendre

$$\mathbf{u}^A = (e^{i\Theta_A \mathbf{a}^A \mathbf{J}} - 1) \mathbf{v} \quad (49)$$

$$\mathbf{u}^B = (e^{i\Theta_B \mathbf{a}^B \mathbf{J}} - 1) \mathbf{v}. \quad (50)$$

A Burgers-vektor (44) értelmezése szerint, valamint felhasználva az (F3) összefüggést adódik, hogy

$$\begin{aligned} \mathbf{B} &= \mathbf{a}^B (\mathbf{v} \mathbf{a}^B) - \mathbf{a}^A (\mathbf{v} \mathbf{a}^A) + [\mathbf{v} - \mathbf{a}^B (\mathbf{v} \mathbf{a}^B)] \cos \Theta_B - [\mathbf{v} - \mathbf{a}^A (\mathbf{v} \mathbf{a}^A)] \cos \Theta_A + \\ &+ (\mathbf{v} \times \mathbf{a}^B) \sin \Theta_B - (\mathbf{v} \times \mathbf{a}^A) \sin \Theta_A \end{aligned} \quad (51)$$

és

$$M^{ij} = (e^{i\Theta_B \mathbf{a}^B \mathbf{J}} - e^{i\Theta_A \mathbf{a}^A \mathbf{J}})^{ij}. \quad (52)$$

Abban a speciális esetben, amikor $\mathbf{a}^A = -\mathbf{a}^B = \mathbf{d}$ és $\Theta_A = \Theta_B = \frac{\Theta}{2}$ az összefüggés a

$$\mathbf{B} = 2(\mathbf{v} \times \mathbf{d}) \sin \frac{\Theta}{2} \quad (53)$$

alakra egyszerűsödik, ami nem más, mint a nagyszögű szemcsehatárookra vonatkozó Frank-féle formula. Ilymódon tehát látható, hogy a szemcsehatárookra vonatkozó klasszikus eredmények kvantummechanikailag is alátámaszthatók.

A számítások konkrét esetekre történő alkalmazása természetesen bonyolult feladat, s általában csak megfelelő közelítő feltevések bevezetésével kivitelezhető. Megjegyezzük továbbá, hogy bár az M mátrixot pusztán a szomszédos szemcsék orientációkülönbségének felhasználásával származtattuk, az egyes szemcsékben fellépő elmozdulástér általában nem tisztán forgási jellegű, hanem nyúlási (összenyomási) komponense is van. Kivételt képez a kisszögű határeset, amikor a Frank-formula a

$$\mathbf{B} = \mathbf{v} \times \mathbf{d} \quad (54)$$

alakra egyszerűsödik.

5. SZÁMÍTÓGÉPES SZEMCSEHATÁR MODELLEK

A gyors számítógépek kifejlődésével lehetővé vált, hogy a rács hibák tulajdonságait egy mikrokristály számítógépben történő „felépítésével” vizsgáljuk. Természetesen a számítógépben figyelembe vehető atomok száma még mindig nagyságrendekkel kisebb, mint egy valódi minta atomjainak száma, s az atomi elrendeződést megszabó egyenletek is rendkívül sok, néha elméletileg nehezen indokolható közelítést tartalmaznak [31].

A számítógépes modellekben általában az atomelrendeződés variálásával keressük az adott rendszer minimális energiájú állapotát. A kristály energiáját megfelelően megválasztott empirikus vagy elméletileg számolt potenciál segítségével határozzuk meg. Potenciálként legtöbb esetben valamilyen centrális potenciált használunk [31].

Az atomelrendeződés variálása a feladat természetétől és a gépi lehetőségektől függően igen sokféle módon történhet. Egy lehetséges eljárás pl. a következő [32]. Tekintsünk két adott orientációviszonyban levő szomszédos kristályszemcsét. A határfelülethez közelítve mindkét kristály rácsszerkezete egyre inkább torzul. Jelöljünk ki a határ mindkét oldalán egy-egy elegendően széles sávot, amelyen túl már mindkét kristály rácsszerkezete torzulásmentesnek tekinthető. Ez a sáv a szemcsehatár, amelyet megfelelő számú atom elrendezésével úgy kell kitöltenünk, hogy a rendszer energiája minimális legyen.

Kiindulásként helyezzünk el ebben a sávban véletlenszerűen N atomot és számítsuk ki a rendszer energiáját. Ezután mozdítsunk el egy atomot kissé és vizsgáljuk, hogy csökkenhet-e ezáltal a rendszer energiája. A kiválasztott atom legkedvezőbb helyzetét megtalálva ismételjük meg ezt az eljárást a többi atomokkal is. Az utolsó atom után térjünk vissza ismét az elsőhöz és ismételjük meg az egész folyamatot. Ezeket a ciklusokat addig ismételjük, míg adott atomszám mellett a rendszer energiája minimálissá válik. Ezután hajtsuk végre az eljárást az atomszám megváltoztatásával és így válasszuk ki a minimális energiájú atomelrendeződést.

Ez az eljárás egy teljesen véletlenszerű atomelrendeződésből kiindulva jut el a szemcsehatár szerkezetéhez. A számítógépes vizsgálatok többsége az egyszerűbben kezelhető koincidens vagy közel koincidens határok atomelrendeződésének meghatározására irányul. Ezek esetén a fenténél sokkal speciálisabb kiindulási feltételek használhatók [33–38]. Ennek az az oka, hogy a geometriai modellek alapján feltételezhető, hogy a koincidens határok szabadenergiája minimális, s a határréteg szélessége is jól becsülhető. Bár az energia minimumra vonatkozó vizsgálatokat többen is cáfolják [33, 39], ezeknek a geometriailag egyszerű határszerkezeteknek a pontos meg-

értése elvi szempontból továbbra is jelentős marad a különböző típusú (diszlokációs, geometriai) elméletek összeegyeztetése szempontjából.

Pond és munkatársai speciális koincidens határok szerkezetét vizsgálták alumíniumban [38, 39], ill. tércentrált köbös fémekben [40]. Elméleti eredményeiket elektronmikroszkópos vizsgálatokkal is alátámasztották. A tércentrált köbös fémekre a Johnson-féle (41), az alumínium esetén pedig a *Dagens, Rasolt és Teylor* által konstruált potenciált használták [42]. Az utóbbi esetben problémát okozott, hogy a potenciál hosszútávú, ezért önkényesen választott levágási sugarat kellett választani. Bár a különböző levágási sugarak mellett számított energiaértékek $\pm 40\%$ -kal is eltértek egymástól, a kapott határszerkezet lényegében azonos volt [38]. Ebből arra következtethetünk, hogy a szemcsehatár szerkezetét alapvetően az első és második szomszédok határozzák meg, a határenergia számításához azonban igen nagy távolságban levő atomok kölcsönhatását is figyelembe kellene venni. A határszerkezet meghatározására használt számítógépes algoritmus a helyi atomi relaxáció mellett a szomszédos szemcsék merev translációját is figyelembe vette. Ez utóbbi az elektronmikroszkópos felvételeken is jól ellenőrizhető.

A kísérleti és elméleti vizsgálatok legfontosabb eredményei a következők:

1. Alumíniumban a relaxációt döntően a koincidens helyzetből történő merev elmozdulás szabja meg [38, 39].

2. Tércentrált szerkezetekben az atomok helyi relaxációja és a két kristályfél merev translációja egyenrangú szerepet játszik a határ szerkezetének kialakításában [40].

3. Egy speciális határban különböző mechanikailag stabilis helyzetek léteznek, amelyeket különböző translációs vektorok jellemeznek. Ezek a karakterisztikus elmozdulások a Bernal-féle [7, 27] poliéderekhez hasonló szoros illeszkedésű csoportok kialakulásához vezetnek [39].

4. A szemcsehatárokat a tércentrált köbös fémekben is kompakt atomcsoportok építik fel, s ezek az atomcsoportok valószínűleg mind a kisszögű, mind pedig a nagyszögű határoknak jellegzetes alapegységei [40].

5. A tércentrált köbös szerkezetekben gyakoribbak a koincidenú atomok mint a felületen centrált köbös szerkezetekben [40].

6. A nagyszögű határok energiája a korábbi koincidens modellek feltételezésével adódó eredménnyel szemben nem monoton függvénye a koincidens helyek sűrűségének [38].

6. ÖSSZEFOGLALÁS

Áttekintettük a szemcsehatárok szerkezetéről szóló elméletek legfontosabb típusait. Végső fokon az elméletek mindegyike energetikai alapokon nyugszik, a felhasznált közelítések azonban nagyon különbözőek.

Jelenleg a számítógépes modellek kifejlesztése látszik a leginkább gyümölcsözőnek, mert a szemcsehatárok atomszerkezete ezekből a számításokból kapható meg legpontosabban. Nem szabad azonban megfedkezünk arról, hogy a számítógépes modellek is igen sok nehezen ellenőrizhető és esetenként fizikailag megalapozatlan feltevést tartalmaznak, valamint, hogy semmi sem biztosít bennünket arról, hogy abszolút és nem lokális energia minimum értékeket határoztunk meg. Ezek a vizsgálatok igen sokszor nagyon meglepő és jelenleg még nehezen értékelhető eredményre vezetnek. Ingle és Crocker igen megalapozottnak tűnő számításai szerint a felületen

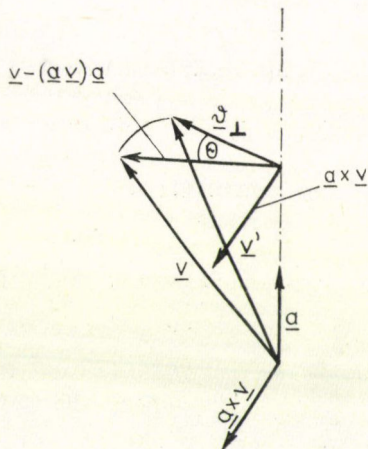
centrált köbös fémek (110) csavart határai alacsony szimmetriájú szerkezetbe relaxálva érik el minimális energiájú állapotukat [37]. Ez azonban alapjaiban kérdőjelezi meg a szimmetriafeltételeken nyugvó igen tetszetős geometriai elméletek létjogosultságát, amelyeket a diszlokációs modellek is megerősítenek. Ugyanakkor a Bernal-féle poliéderek számítógépes megfelelői arra utalnak, hogy érdemes a véletlen geometriájú modelleknek több figyelmet szentelnünk.

Mindent összevetve megállapítható, hogy a határszerkezetek megállapítására szolgáló egységes elmélet még nem született.

7. FÜGGELÉK

Határozzuk meg annak a \mathbf{v}' vektornak a koordinátáit, amely a \mathbf{v} vektornak az a egységvektorral megadott tengely körüli, véges nagyságú θ szöggel történő elforgatásakor keletkezik.

Legegyszerűbb ezt a vektort az \mathbf{a} , \mathbf{v} , és $\mathbf{a} \times \mathbf{v}$ vektorok lineáris kombinációjaként megadni. (Ezek a vektorok csak akkor eshetnek egy egyenesbe, ha a \mathbf{v} vektor az \mathbf{a} tengelybe esik.) Minthogy a \mathbf{v} vektor \mathbf{a} irányú $\mathbf{v}\mathbf{a}$ komponense az elforgatás során nem változik, elegendő a tengelyre merőleges $\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}$ vektor \mathbf{v}' elforgatottját meghatározni.



F1. ábra. A θ szöggel elforgatott vektor felbontása

Ennek a \mathbf{v}' vektornak az abszolút értéke $|\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}|$ és egy síkban van az egymásra merőleges $\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}$ és $\mathbf{v} \times \mathbf{a}$ vektorokkal. Az F.1. ábra alapján

$$\mathbf{v}' = |\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}| \cos \theta \frac{\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}}{|\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}|} + |\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}| \sin \theta \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{a}}{|\mathbf{v} \times \mathbf{a}|}. \quad (\text{F1})$$

Mivel

$$|\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}| = |\mathbf{v} \times \mathbf{a}|,$$

így

$$\mathbf{v}' = (\mathbf{v} - (\mathbf{a}\mathbf{v})\mathbf{a}) \cos \theta + (\mathbf{v} \times \mathbf{a}) \sin \theta. \quad (\text{F2})$$

Ezzel az elforgatott vektor a

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} \cos \Theta + (\mathbf{a}\mathbf{v})(1 - \cos \Theta) + (\mathbf{v} \times \mathbf{a}) \sin \Theta \quad (\text{F3})$$

alakban írható fel. Ez az összefüggés sokkal tömörebben is kifejezhető a

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F4})$$

mátrixok felhasználásával. Ekkor ugyanis az elforgatott vektor a

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} e^{i\Theta \mathbf{a}\mathbf{J}} \quad (\text{F5})$$

alakban írható fel, ahol \mathbf{J} komponensei a fenti mátrixok és az exponenciális a megfelelő sorfejtéssel értelmezzük, azaz

$$e^{i\Theta \mathbf{a}\mathbf{J}} = e^{i\Theta a_1 J_1} e^{i\Theta a_2 J_2} e^{i\Theta a_3 J_3} = \left(E + \Theta a_1 J_1 + \frac{\Theta^2 a_1^2}{2!} J_1^2 + \dots \right) \\ \left(E + \Theta a_2 J_2 + \frac{\Theta^2 a_2^2}{2!} J_2^2 + \dots \right) \left(E + \Theta a_3 J_3 + \frac{\Theta^2 a_3^2}{2!} J_3^2 + \dots \right),$$

ahol \mathbf{E} az egységmátrix.

Ezt felhasználva az exponenciális operátor mátrixelemei a következők:

$$(e^{i\Theta \mathbf{a}\mathbf{J}})_{kl} = (\delta_{kl} - a_k a_l) \cos \Theta + a_k a_l + \varepsilon_{klm} a_m \sin \Theta. \quad (\text{F6})$$

IRODALOM

1. Rajkovits Zs. és Tasnádi P., *Magy. Fiz. Foly.* 29, 235 (1981)
2. Tasnádi P. és Rajkovits Zs. *Magy. Fiz. Foly.* 29, 255 (1981)
3. B. Burton, *Diffusional Creep of Polycrystalline Materials*, Trans. Tech. Publ. Long. Beach, Ohio, 1977.
4. E. D. Hondros, *Grain Boundary Structure and Properties*, eds. G. S. Chadwick and D. A. Smith. Academic Press, London, 1976. p. 265.
5. D. G. Brandon, B. Ralph, S. Ranganathan and M. S. Wald, *Acta Met.* 12, 813, 1964.
6. W. Bollmann, *Crystal Defects and Crystalline Interfaces*, Springer-Verlag, Berlin, 1970.
7. J. D. Bernal, *Proc. Roy. Soc. A280*, 299, 1964.
8. M. F. Ashby, F. Spaepen and S. Williams, *Acta Met.* 26, 1647, 1978.
9. Y. Ishida, *Ref. 4.* p. 93.
10. H. B. Aaron and G. F. Bolling, *Ref. 4.* p. 107.
11. W. T. Read and W. Shockley, *Phys. Rev.* 78, 275, 1950.
12. E. Kröner, *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen*, Springer-Verlag, Berlin, 1958.
13. B. A. Bilby, R. Bullough and E. Smith, *Proc. R. Soc. A231*, 263, 1955.
14. G. Saada, *Acta Met.* 27, 921, 1979.
15. C. Rey and G. A. Saada, *Phil. Mag.* 33, 825, 1976.
16. M. J. Marcinkowski and K. Sadananda, *phys. stat. sol. (a)* 17, 423 and 18, 361, 1973.
17. J. Marcinkowski and E. S. Dwarakadasa, *phys. stat. sol. (a)* 19, 597, 1973.
18. K. Jagannadham and M. J. Marcinkowski, *phys. stat. sol. (a)* 50, 293, 1978.
19. M. J. Marcinkowski, *phys. stat. sol. (a)* 60, 108, 1980.
20. M. J. Marcinkowski, *Unified Theory of the Mechanical Behavior of Matter*, Wiley, New York, 1979.
21. K. Jagannadham and M. J. Marcinkowski, *Cryst. Latt. Def.* 8, 81, 1979.

22. *M. J. Marcinkowski and K. Jagannadham*, phys. stat. sol. (a) *50*, 601, 1978.
23. *R. W. Wagner and B. Chalmers*, J. Appl. Phys. *31*, 581, 1960.
24. *H. Gleiter*, Zeitschrift f. Metalkde *61*, 282, 1961.
25. *Juhász A.*, Magy. Fiz. Foly. Megjelenés alatt.
26. *H. Gleiter, E. Hornbogen and G. Baro*, Acta Met. *16*, 105, 1968.
27. *J. D. Bernal*, Scient. Am. 1960. p. 124.
28. Üvegfémek szerkezete és tulajdonságai, Tanulmány, Budapest, 1977.
29. *H. G. Hillenbrand, E. Hornbogen, U. Köster*, 5th Internat. Symp. High Purity Mest. in Sci. and Technol. Poster Abstr. 376 May 1980. Dresden.
30. *M. Wadati*, Physics Reports, *50*, 89, 1979.
31. *R. J. Harrison, G. A. Bruggeman and G. H. Bishop*, Ref. 4. p.
32. *C. Goux*, Krist. und Techn. *14*, 251, 1979.
33. *M. J. Weins*, Surface Sci. *31*, 138, 1972.
34. *G. Hasson, I. Y. Bros, J. Herbeval, M. Biscondi and C. Goux*, Surf. Sci. *31*, 115, 1972.
35. *M. J. Weins*, Battele Colloquium on Interatomic Potentials and Simulation of Lattice Defects, eds. *P. C. Gehlen et. al.* Plenum Press, London, 1972. p. 696.
36. *R. E. Dahl, J. R. Beeler and R. D. Borquin*, Ref. 35. p. 673.
37. *K. W. Ingle and G. A. Crocker*, Phil. Mag. *41*, 713, 1980.
38. *R. C. Pond and D. A. Smith*, Proc. Roy. Soc. London *A357*, 453, 471, 1977.
39. *R. C. Pond, D. A. Smith and V. Vitek*, Acta Met. *27*, 235, 1979.
40. *V. Vitek, O. A. Smith and R. C. Pond*, Phil. Mag. *41*, 649, 1980.
41. *R. A. Johnson*, Phys. Rev. *A134*, 1329, 1964.
42. *L. Dagens, M. Rasolt and R. Taylor*, Phys. Rev. *B11*, 2726, 1975.

9. SZEMCSEHATÁR SZEGREGÁCIÓ

RAJKOVITS ZSUZSA

ELTE, Általános Fizika Tanszék

TARTALOM

1. Bevezetés	459
2. Határfelületek	459
3. Szemcsehatár szegregáció	462
3.1. Az egyensúlyi szemcsehatár szegregáció elméletei	462
3.2. Adszorpciós elméletek	463
3.2.1. Langmuir—McLean elmélet	463
3.2.2. A részleges BET elmélet	464
3.2.3. Graham-féle tömeghatás közelítés	465
3.3. Többretegű adszorpció	466
3.3.1. BET elmélet	466
3.4. Szegregáció egymással kölcsönható szennyezők esetén	467
3.5. Szegregáció többkomponensű rendszerekben	468
4. Összefoglalás	469
5. Irodalom	470

1. BEVEZETÉS

A szemcsehatármenti dúsulás igen fontos jelenség a fémekben. Az anyagok számos tulajdonsága és sok folyamat, mint pl. a szemcsehatármenti törés, ridegedés, szemcsehatár diffúzió értelmezéséhez ismernünk kell a szegregáció törvényszerűségeit. A téma az utolsó évtizedekben mind elméleti, mind gyakorlati szempontból rendkívül nagy fejlődésen ment keresztül. A fejlődés főleg az egyre tökéletesedő kísérleti technikáknak köszönhető. Az összegyűlt eredmények értelmezését a szegregációs modellek fejlődése követte [1].

2. HATÁRFELÜLETEK

Ismeretes, hogy két különböző fázis határfelületére merőleges irányban az anyag inhomogén, ugyanis a határrétegben az egyik fázis oldaláról mások a molekuláris kölcsönhatások mint a másikról. A határfelületen levő alkotórészek (atomok, molekulák) szabadentalpiája eltér a fázis belsejében levő részekétől. Ennek eredményeképpen a részecske koncentráció a határrétegben általában nagyobb lesz, mint a vele termikus egyensúlyban levő, szomszédos fázis belsejében. Ezen felületi adszorpció útján tehát bizonyos alkotók a határrétegben feldúsulnak. Híg oldatok felületi feszültsége például felületi adszorpció miatt tér el a tiszta oldószerétől. Felületi adszorpció következménye az oldatok felületi feszültségének az oldószer felületi feszültségé-

től való eltérése. Az oldattal egyensúlyban levő szabad oldatfelület egységnyi nagyságú darabján adszorbeált anyag mennyisége

$$\Gamma = - \frac{a}{RT} \frac{d\gamma}{da}$$

Gibbs-féle egyenlettel határozható meg [2]. Γ az oldott anyag koncentráció többlete a felületben, a az oldat aktivitását jelenti. Híg oldatok esetében az a aktivitást a c koncentrációval helyettesíthetjük, amivel a Gibbs egyenlet a

$$\Gamma = - \frac{c}{RT} \frac{d\gamma}{dc}$$

alakot ölti. Az egyenletből láthatjuk, hogy ha $d\gamma/dc < 0$, azaz az oldat felületi feszültsége kisebb az oldószer felületi feszültségénél, Γ -ra pozitív érték adódik. Azokat az anyagokat, melyeknek az oldószerhez való adagolása a felületi feszültséget csökkenti, kapilláráktív anyagoknak nevezzük. A kapilláráktív anyagok tehát pozitív felületi adszorpcióval a határfelületben koncentrációnövekedést eredményeznek.

Vannak azonban olyan, negatív adszorpcióval jellemezhető anyagok is, melyeknek az oldószerhez való adagolása az oldat felületi feszültségét növeli [2]. Ilyen esetben a felületi réteg az oldat belsejéhez képest szennyezőben elszegényedik. Az ilyen tulajdonságokkal jellemezhető anyagokat kapillárinaktívoknak nevezzük.

Vizes oldatokat tekintve a kapilláráktív anyagok általában szerves anyagok (alkoholok, aldehidek, ketonok, karbonsavak stb.), míg néhány szerves anyag, (cukrok, fehérjék, glicerin, karbamid...), valamint sok elektrolit kapillárinaktív.

Míg a pozitív adszorpció már híg oldatokban is számottevően nagy lehet, addig a negatív adszorpció általában kicsi. Pl. a benzol felületi feszültsége $29 \frac{\text{din}}{\text{cm}}$, kevés víz hatására $33 \frac{\text{din}}{\text{cm}}$ -re nő. A határfelületi réteg vízben szegényebb, mint az oldat belseje.

A víz a benzolban csak kevésbé (0,23 s %) oldódik.

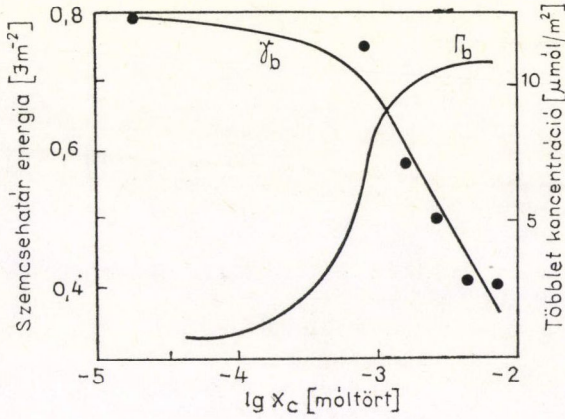
Az oldatok felületi feszültségéhez hasonlóan alakul az ötvözetekben levő határfelületek energiája is. Az ötvöző a mátrix határfelületeinek energiáját mindig pozitív adszorpció folytán csökkenti [3]. Mérve a határfelületi energiát a mátrixkoncentráció függvényében a Gibbs-féle adszorpciós egyenlet felhasználásával a határfelületben kialakuló ötvöző többletkoncentráció meghatározható.

Az 1. ábra mutatja a szemcsehatár felületi energiáját és a felületi többletkoncentrációt Fe-ra a mátrix foszfor koncentrációjának függvényében [1].

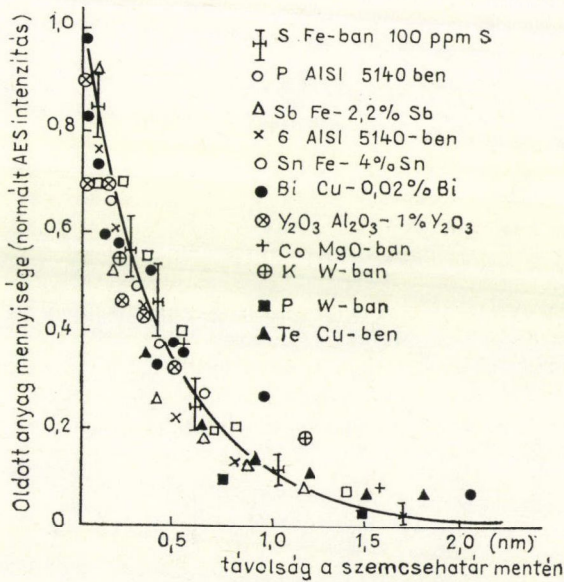
A szilárd anyagok belsejében levő belső határfelületek a szemcsehatárok, a fázishatárok és a rétegződési hibák. A belső határfelületeknél kialakuló lokális koncentrációváltozást nevezzük szegregációnak. A szegregáció az alkotóelemeknek a mátrix és a határfelületek közötti termikus újraeloszlásával valósul meg. Az elemek újraeloszlása a szabad felületen lejátszódó adszorpcióhoz hasonlóan egyensúlyi jelenség.

Azonos fázisban levő, többkomponensű rendszerekben a szemcsehatárok mentén az ötvözők koncentrációja nagyobb mint a mátrix belsejében. A jelenséget szemcsehatár szegregációnak nevezzük.

A szemcsehatár szegregáció kísérleti vizsgálatára direkt és indirekt vizsgálati módszerek egyaránt ismeretesek.



1. ábra. A szemcsehatár felületi energia és a felületi többletkoncentráció a mátrix koncentrációjának függvényében. ($T=1450^\circ\text{C}$, P szegregációja δ -vasban)



2. ábra. Egy eltört forgó acél alkatrészben AES és argon ion marással mért szennyező profil számos anyagra vonatkozóan. A folytonos vonal egzakt módon a szemcsehatár síkon levő atomokra vonatkozik

A már említett szemcsehatár energia mérés mellett számos egyéb indirekt vizsgálati eljárás létezik (Rtg-vizsgálatok, sebesség mérés, mikrokeménység mérés, szemcsehatár nedvesedés mérés...) [4]. A legelterjedtebben alkalmazott direkt módszer az Auger elektronspektroszkópia (AES). Használatosak még az autoradiográfia, kémiai maratás, aktivációs analízis, térionmikroszkópia, lumineszcencia módszerek a szegregált többletkoncentráció meghatározására [4]. A 2. ábra mutat példát AES segítségével meghatározott szemcsehatár menti ötvöző eloszlásokra.

3. SZEMCSEHATÁR SZEGREGÁCIÓ

A szennyezők a szemcsehatárban általában diffúzió útján dúsulhatnak fel. A jelen dolgozatban a szegregáció kinetikájával nem foglalkozunk, csak az egyensúlyi állapotot vizsgáljuk. Ez azt jelenti, hogy az eredményeink csak olyan fémekre érvényesek, amelyeknél a gyakorlatban alkalmazott hőkezelések során számíthatunk az egyensúlyi állapot kialakulására. A továbbiakban csak híg ötvözetekben kialakuló, *egyensúlyi szemcsehatár szegregáció*-tulajdonságait vizsgáljuk.

3.1. Az egyensúlyi szemcsehatár szegregáció elméletei

Minden szegregációs vizsgálat alapfeladata a szemcsehatárban kialakult többlet szennyező koncentráció meghatározása és a többletkoncentráció és a mátrix szennyező koncentrációja között fennálló összefüggés megállapítása.

A szennyező atomok szempontjából a rácsban levő helyekhez viszonyítva a szemcsehatár helyei, a határ rendezetlenségei miatt energiakülönbséggel rendelkeznek. Egyensúlyi szegregáció esetén a szennyező atomok ezen helyek között a statisztikus termodinamika törvényeinek megfelelően oszlanak el.

A szilárd-szilárd határfelületen történő adszorpció hasonló folyamat a szilárd-gáz adszorpcióhoz. Ezért a már az 1920-as években ismert gázadszorpció elméletek megfelelő alkalmazásával a szegregációs jelenségek is leírhatók [3].

Az adszorbeálódó atomok tulajdonságaitól függően egy- vagy többretegű adszorpció játszódik le a határfelületen. A határréteg tartalmazhat különböző adszorpciós potenciállal jellemezhető helyeket. A felületi adszorpció során egymással is kölcsönhatásba léphetnek az adszorbeálódó szennyezők. Ezeknek a tényezőknek a figyelembevételétől függően számos szegregációs elmélet született.

Az első, még nem a felületi adszorpcióra épülő szennyező szegregációra vonatkozó számítást *Cottrell* végezte el [5], a diszlokáció-szennyező kölcsönhatás figyelembevételével. Ez utóbbi eredményeképpen a diszlokációt egyensúlyi szennyező atmoszféra veszi körül, amelynek koncentrációja T hőmérsékleten a

$$c = c_0 \exp \left[\frac{E_d}{RT} \right] \quad (1)$$

összefüggéssel adható meg, ahol c_0 a szennyező mátrixbeli koncentrációja, az E_d kölcsönhatási energia pedig a diszlokáció sajátenergiájának a szennyező adszorpció következtében fellépő csökkenése.

3.2. Adszorpciós elméletek

3.2.1. Langmuir—McLean elmélet [6]

A legegyszerűbb adszorpciós elméletek egyféle szennyező, egyrétegű adszorpciójára vonatkoznak. Egyrétegűnek akkor tekinthető az adszorpció, ha az a^3 atomtérfogatú szegregálódó atomból egységnyi felületre a^{-2} darab atom jut [7]. A Langmuir modell egyetlen elem adszorpcióját vizsgálja egy olyan határfelületen, amelynek helyeit teljesen egyenértékűnek tekinti. Szilárd fázisban belső határfelületek esetére a modellt McLean alkalmazta először.

Határozzuk meg az előbb említett feltételek felhasználásával a szennyező egyensúlyi koncentrációját a szemcsehatár mentén.

Vegyünk egy határfelülettel rendelkező tiszta anyagot (polikristályos anyag), s vigyünk be szennyező atomokat az anyagba. A kristály szabadentalpiája ekkor három hatás miatt változik meg:

1. A szennyező és a szemcsehatár kölcsönhatási energiája miatt.
2. A szennyező bevitel konfigurációs entrópiátagot eredményez.
3. Megváltozik a vibrációs entrópia is, a tömegek különbsége miatt.

A szabadentalpia egyensúly esetén minimális, kiszámolható az atomok egyensúlyi eloszlása.

A mátrixban levő P számú oldott atom N számú rácshely, a szemcsehatárban elhelyezkedő p számú oldott atom pedig n számú szemcsehatárban levő, torzult rácshely között véletlenszerűen oszlik el. Ebben az esetben az oldott atomok járuléka a szabadentalpiához:

$$G = pe + PE - kT \ln w, \quad (2)$$

ahol E az atomonkénti energia a rácspan, e pedig a határfelületen. A harmadik tag a rácspan és a szemcsehatárban oldott atomoknak megfelelő konfigurációs entrópia. A legvalószínűbb elrendezést állandó nyomáson és hőmérsékleten a $p + P = \text{állandó}$ feltétel mellett szabadentalpia minimuma adja meg.

A számítás szerint az oldott atomok eloszlása a

$$\frac{p}{n-p} = \frac{P}{N-P} \exp \left[\frac{E-e}{kT} \right] \quad (3)$$

alakban írható fel. A részecskeszám helyett a koncentráció (móltört) kifejezés alkalmazásával a (3) egyenlet az alábbi formára hozható:

$$\frac{X_b}{X_{b0} - X_b} = \frac{X_c}{1 - X_c} \exp \left[\frac{\Delta G}{RT} \right]. \quad (4)$$

Itt X_b a szennyező koncentrációja a határrétegben, X_{b0} az X_b telítési értéke. Az X_c a határral egyensúlyban levő mátrix szennyező koncentrációja, ΔG a szegregáció szabadentalpiája egy mól oldott anyagra vonatkozóan, amely tartalmazza a rezgési entrópia változást. A (4) összefüggést Langmuir—McLean egyenletnek nevezzük.

Az $X_b/X_{b0} = \Theta_b$ változó a szemcsehatár „befedettségre” jellemző. A Θ_b bevezetésével és a híg oldatokra érvényes $(1 - X_c) \sim 1$ közelítéssel a (4) kifejezés a

$$\Theta_b = \frac{K_0 X_c}{1 + K_0 X_c} \quad (5)$$

formát ölti, ahol $K_0 = \exp(\Delta G/RT)$ [3].

A ΔG szabadentalpiát közelíthetjük azzal a E_1 rugalmas energiával, amelyet a szennyező atom rácshelyre való beépülése okoz. Az r_0 sugarú rácshelyre kerülő r_1 sugarú szennyező esetén

$$E_1 = \frac{24\pi\xi KGr^3}{3K + 4G} \quad (6)$$

adódik [6], ahol K a szennyező térfogati rugalmassági modulusza, G a mátrix nyírási modulusza, r a szennyező sugara a rácspan és $\xi = (r_1 - r_0)/r_1$.

3.2.2. A „részleges” Brunauer—Emmett—Teller [BET] elmélet [8]

A BET elmélet eredetileg többrétegű gázadszorpció értelmezésére született, de alkalmazható szilárdtestekben, azonos értékű adszorpciós helyekre épülő, nem kölcsönható szennyezők egyrétegű adszorpciójára is [9]. Az elmélet a szilárd oldhatóság határának figyelembevételével a szegregáció pontosabb leírását adja.

A mátrixbeli szilárd oldhatóság határa kevésbé oldódó anyagokra az

$$X_c^0 = \exp\left[\frac{\Delta G_{\text{old}}}{RT}\right] \quad (7)$$

összefüggéssel adható meg, ahol ΔG_{old} az oldódási szabadentalpia. A BET elmélet szerint a határban kialakult többletkoncentrációra a következő kifejezés adódik [1]:

$$\frac{X_b}{X_b^0 - X_b} = \frac{X_c}{X_c^0} \exp\left[\frac{-\Delta G'}{RT}\right], \quad (8)$$

ahol $\Delta G'$ a szegregációkor fellépő szabadentalpia változás. A (7) kifejezést figyelembe véve az

$$\frac{X_b}{X_b^0 - X_b} = X_c \exp\left[\frac{-\Delta G}{RT}\right] \quad (9)$$

összefüggést kapjuk [3], ahol $\Delta G = \Delta G' + \Delta G_{\text{old}}$ az adszorpciós és oldódási szabadentalpia összege. Bár a részleges BET elmélet ugyanolyan feltételek esetén érvényes, mint a McLean elmélet, a szegregációs szabadentalpiára azonban a tapasztalattal jobban egyező eredményt ad és tartalmazza az X_c^0 oldhatósági határkoncentrációt is [9].

A BET elmélet az $X_c = X_c^0$ koncentrációk esetén alkalmazható. Ennél nagyobb szennyezőtartalom precipitációhoz vezet, ekkor a szegregáció mechanizmusa megváltozik, egy új fázis jelenik meg. Megmutatható, hogy bizonyos szennyezők szegregációja viszonylag magasabb hőmérsékleteken jól követi a (8) BET egyenletet. Ala-

csenyebb hőmérsékleteken, ahol a szennyező koncentráció a mátrixban eléri, vagy meghaladja az oldhatóság határát, azaz $X_c \cong X_c^0$, a koncentráció a szemcsehatárban az

$$\frac{X_b}{X_b^0 - X_b} = \exp \left[\frac{\Delta G'}{RT} \right]$$

összefüggés szerint változik meg.

3.2.3. Graham-féle tömeghatás közelítés

Ez az elmélet a szemcsehatár szegregációt a kémiai reakcióhoz hasonlóan, az adszorpciós hely és a szabad szennyező közötti egyensúlyi reakciónak tekinti, s a (4) kifejezéshez hasonló összefüggést szolgáltat.

Az a_x aktivitású szennyező és az a_b aktivitású adszorpciós hely közötti adszorpciós egyensúlyra felírva a tömeghatás törvényét és a_{xb} -vel jelölve az „elfoglalt” helyek aktivitását, a

$$K' = \exp \left[\frac{E_1}{RT} \right] = \frac{[a_{xb}]}{[a_x][a_b]} \quad (10)$$

egyensúlyi egyenlet adódik, ahol E_1 az adszorpciós energia [10]. Az a_{xb} helyett ismét bevezetve a Θ_b paramétert, a (10) kifejezés a

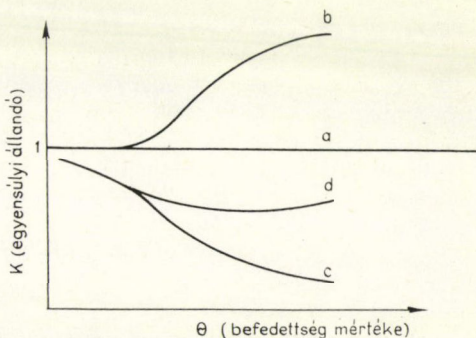
$$K' = \frac{\Theta_b}{X_c(1 - \Theta_b)} \quad (11)$$

formában írható fel, ahonnan a szegregációra jellemző Θ_b „befedettség” mértékét kifejezve, a

$$\Theta_b = \frac{K' X_c}{1 + K' X_c} \quad (12)$$

kifejezést kapjuk.

A (12) kifejezés segítségével különböző adszorpciós tulajdonságú szennyezők adszorpciós egyensúlya is leírható [3]. A 3. ábrán a K' egyensúlyi állandó Θ_b -vel való változására láthatunk néhány lehetőséget, melyből magára az adszorpciós folyamatra is következtethetünk. Az ideális esetnek az (a) görbe felel meg, ekkor a K' állandó független a Θ_b -tól. Az ábrán látható b görbe esetén a K' egyensúlyi állandó egy Θ_b értéktől kezdve a befedettség további növelésével nő. A b görbével jellemzett esetben az adszorbeálódó atomok kölcsönhatnak egymással, ez a

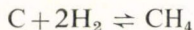


3. ábra. A K egyensúlyi állandó függése a szemcsehatár befedtségére jellemző Θ paramétertől

kölcsönhatás azonban csak akkor válik számottevővé, ha már elegendő atom található a felületen, azaz nagyobb Θ_b értékek mellett.

Abban az esetben viszont, ha eltérő adszorpciós potenciálú helyek egy csoportja alakul ki a felületen, először az aktívabb helyek telítődnek. A folyamatot a c görbe jellemzi, a K' csökken a Θ_b növekedésével. A nem egyenértékű helyekre épülő, egymással kölcsönható szennyezők szegregációjára jellemző a d görbe, ahol a K' csökkenése utáni újbóli növekedés az atomok kölcsönhatásából származik, mely csak nagyobb befedettségénél jelentkezik.

Amennyiben nagyobb méretű a szennyező atom, mint az adszorpciós hely, egy atom több helyet foglalhat el a felületben. Erre az adszorpciós egyensúlyra a



kémiai reakcióhoz hasonlóan, a

$$K_2 = \frac{[a_{xb}]}{[a_x][a_b]^2} \quad (13)$$

egyensúlyi állandó írható fel. A Θ_b bevezetésével a (13) összefüggés a

$$K_2 = \frac{\frac{1}{2} \Theta_b}{X_c(1 - \Theta_b)^2} \quad (14)$$

formában írható fel. Ebből az n adszorpciós helyet elfoglaló szennyező esetére extrapolálhatunk. Ekkor az egyensúlyi állandóra a

$$K_n = \frac{\frac{1}{n} \Theta_b}{X_c(1 - \Theta_d)^n} \quad (15)$$

kifejezés adódik. A (11) és (15) egyenletek felhasználásával az egyensúlyi állandók között a

$$K' = K_n \cdot n(1 - \Theta_b)^{n-1} \quad (16)$$

összefüggéshez jutunk, ami az 1. ábrán látható $K(\Theta_b)$ függvényeket adja meg. Az $n=1$ ugyanis az ideális esetnek felel meg, míg $n=2$ esetén (15)-ből lineáris csökkenést kapunk ($K' = 2K_2 - 2K_2\Theta_b$).

Még nagyobb méretű szennyező esetén az $n > 2$ miatt a csökkenés kifejezettebbé válik. A fenti egyszerű modell segítségével nagyobb méretű szennyező adszorpciós mechanizmusa a $K(\Theta_b)$ függvény meghatározásával, illetve elemzésével könnyen eldönthető. Az adszorpciós helynél kisebb méretű ($n < 1$) szennyező esetére további megfontolásokra van szükség [9].

3.3. Többrétegű adszorpció

3.3.1. BET elmélet

A gyakorlatban általában egyrétegű szegregáció figyelhető meg, de ritkán többrétegű adszorpció is előfordul (pl. az Sn szegregációja vasban három rétegű is lehet [9]). Többrétegű adszorpció esetén második fázis megjelenése nélkül épül egymásra több szennyező réteg a határfelületben.

Míg az első réteg kialakulásakor E_1 adszorpciós energiával kell számolnunk, addig a további rétegek esetén az adszorpció energiája az E_1 oldódási energia. Több réteg lokálisan is képződhet, létrejöttéhez nem szükséges a teljes adszorbeáló felület egyrétegű befedettsége. Ebben az esetben a határbeli többletkoncentráció és a mátrix szennyező koncentrációja között az

$$\frac{X_{b0}}{X_b} \frac{X_c}{X_{c0} - X_c} = \frac{1}{K'} + \frac{K' - 1}{K'} \frac{X_c}{X_{c0}} \quad (17)$$

összefüggés áll fenn, ahol a $K' = \exp \left[\frac{E}{RT} \right]$, X_{b0} az első réteg teljes befedtségének felel meg, a többi változó jelentése már ismert. Ebben az esetben nem vesszük figyelembe egy rétegen belül az atomok kölcsönhatását.

Lea és Hondros a (17) egyenletnél bonyolultabb összefüggést határozott meg két réteg esetére [11]. Az összefüggés helyességét csak szabad felületen történt szegregációra igazolták mostanáig [1].

Nagyon híg ötvözetek esetére a BET elmélet és a „részleges” BET elmélet is az

$$\frac{X_b}{X_{b0}} = X_c \frac{\exp \left[\frac{E}{RT} \right]}{X_{c0}} \quad (18)$$

összefüggéssé egyszerűsödik [7].

3.4. Szegregáció egymással kölcsönható szennyezők esetén

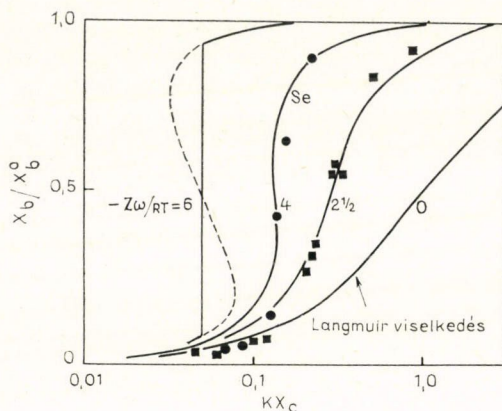
Az előző elméletek egyik alapfeltevése volt, hogy egy szennyező beépülése egy adszorpciós helyre teljesen független attól, hogy a környezetében már vannak elfoglalt helyek. Ez a feltevés abban az esetben helytálló, ha a szemcsehatárban csak kevés szennyező található. Nagyobb befedtség esetén ugyanis számításba kell vennünk a közvetlen szomszédok egymással való kölcsönhatását is. A Fowler elméletben a legközelebbi szomszédok kölcsönhatásával számolva a McLean egyenlethez hasonló

$$\frac{X_b}{X_{b0} - X_b} = X_c \exp \left[\frac{-\Delta G - Z\omega X_b/X_{b0}}{RT} \right] \quad (19)$$

alakú egyenlet adódik, ahol az energiatag a szennyezők ω kölcsönhatási energiáját és a Z laterális koordinációs számot tartalmazza [12]. A (19) összefüggésből látható, hogy számottevő kölcsönhatást csak X_b nagy értékei esetén kell figyelembe vennünk. Az X_b kicsi értékei esetén ugyanis a (19) a (4) McLean egyenletté egyszerűsödik.

Az ω előjele tartalmazza a kölcsönhatás jellegét, $\omega < 0$ esetében vonzó, míg $\omega > 0$ esetben taszító a kölcsönhatás.

Az egymással igen erősen kölcsönható szennyezők esetében (az ω igen nagy negatív értékeinél) a (19) Fowler izotermáktól eltérő alakú görbékkel jellemezhető a szegregációs telítettség. Egy kritikus hőmérsékletnél alacsonyabb hőmérsékleten ugyanis, melyet a $T_c = Z\omega/nR$ értékkel határozhatunk meg, a szegregációs szint ugrásszerűen elérheti a majdnem teljes befedtségnek megfelelő szintet. A 4. ábrán a $-Z\omega/RT = 6$ görbe esetén a szegregációs telítettség hirtelen változik A -ról B értékre [1].



4. ábra. Szemcsehatár szegregáció Fowler izotermája, mérési eredménnyel kiegészítve (Se, Te szegregációja vasban)

3.5. Szegregáció többkomponensű rendszerekben

Többkomponensű, egyfázisú rendszerben is a McLean egyenlethez hasonló összefüggéssel írhatjuk le a szegregációt.

Egy szabályos ternér rendszerre egyrétegű adszorpciót feltételezve Guttman a

$$\frac{X_{bi}}{X_{bi}^0} = \frac{X_{ci} \exp[-\Delta G_i/RT]}{1 + \sum_{j=1}^2 X_{cj} \left[\exp\left(\frac{-\Delta G_j}{RT}\right) - 1 \right]} \quad (20)$$

formulát kapta, ahol az i és j indexek a különböző alkotókra vonatkoznak. A szegregációs szabadentalpiára bevezette a

$$\begin{aligned} \Delta G_1 &= \Delta G_1^0 + \alpha'_{12} X_{b2} \\ \Delta G_2 &= \Delta G_2^0 + \alpha'_{12} X_{b1} \end{aligned} \quad (21)$$

kifejezéseket, ahol ΔG_1^0 és ΔG_2^0 a szabadentalpia abban az esetben, ha a másik szennyező (ötvöző) nincs jelen, α'_{12} a kölcsönhatásra jellemző állandó. Az

$$\alpha'_{12} = \alpha_{12} - \alpha_{10} - \alpha_{20} \quad (22)$$

kifejezés a legközelebbi szomszédok közötti moláris kötési energiaváltozást fejezi ki [13].

Az α_{ij} paramétereket az

$$\alpha_{ij} = ZN_0 \left[\epsilon_{ij} - \frac{1}{2}(\epsilon_{ii} + \epsilon_{jj}) \right] \quad (23)$$

összefüggéssel jellemezhetjük, ahol Z a koordinációs szám, N_0 az Avogadro szám. Az ε_{ij} az i -dik és j -dik legközelebbi szomszéd atomok kölcsönhatási energiáját jelenti. A szabályos oldat közelítést alkalmazva, s ha az (F) mátrix és az (M) ötvöző $F_a I_b$ és $M_a I_b$ összetételű intermetallikus vegyületet képez az I szennyezőkkel, a szennyező X_{CI}^0 oldhatóságára Guttman az

$$X_{CI}^0 = \frac{\exp [\Delta G_{F_a I_b} / bRT]}{\left\{ 1 + \left[\exp \left(-\frac{b\alpha'}{RT} \right) - 1 \right] X_{CM} \right\}^{a/b}} \quad (24)$$

összefüggést adta meg [14]. Az X_{CM} az ötvöző elem koncentrációja és $\Delta G_{F_a I_b}$ az intermetallikus vegyület képződési szabadentalpiája egy telített oldatból. (Az I , M , F jeleket az 1, 2, 0 számokkal helyettesítve az előző részben szereplő összefüggésekhez juthatunk.)

Ha α'_{12} negatív, akkor az ötvöző szegregációja elősegíti a szennyező szegregációját. Az α'_{ij} igen nagy negatív értékei esetén a Fowler elméletnél említett, az ω nagy negatív értékeihez tartozó viselkedés tapasztalható. Az ötvözet hőmérsékletét csökkentve ebben az esetben is az S alakú görbétől eltérő viselkedést tapasztalhatunk, mely a szennyező erőteljes, ugrásszerűen megnövekedett szegregációjával kapcsolatos [14].

4. ÖSSZEFOGLALÁS

Röviden áttekintettük a szemcsehatár szegregáció lehetséges eseteit. A gyakorlatban minden említett esetre találhatunk példát. Egy-egy konkrét esetben a szegregálódott atomok koncentrációjának meghatározása nehéz feladat. Az egyre tökéletesedő kísérleti technikának köszönhető, hogy számos közvetlen és közvetett megfigyelési módszer áll rendelkezésre a szemcsehatárban feldúsult szennyezők mennyiségi és minőségi meghatározására. Számos kísérleti tapasztalat bizonyítja, hogy sokszor már néhány ppm mátrixbeli szennyezőkoncentráció esetén is számolnunk kell a szegregációval. A szemcsehatár szegregáció igen sok egyéb tulajdonságot és fémtani folyamatot befolyásol, így érthető, hogy a jelenség még pontosabb megismeréséhez egyre tökéletesedő kísérleti technikák és ezeket követő elméleti megfontolások születnek.

Jelen dolgozatban a határfelületi jelenségek egy szűkebb területét, a szemcsehatár szegregációt tárgyaltuk. A legegyszerűbb szemcsehatár modell, a sík határ felhasználásával, változó adszorpciós feltételeket vettünk figyelembe. Nem foglalkoztunk a fázishatárokon és a rétegződési hibákon lejátszódó szegregációval, bár ezek is igen fontosak gyakorlati szempontból.

IRODALOM

1. *M. P. Seah*, J. Phys. F.: Met. Phys. *10*, 1043, 1980.
2. *Erdey-Gruz Tibor és Schay Géza*: Elméleti fizikai kémia, Tankönyvkiadó, Budapest, 1964. p. 314.
3. *E. D. Hondros and M. P. Seah*, Met. Trans. *8A*, 1363, 1977.
4. *H. P. Stüwe*, Recrystallization of Metallic Materials: (ed. *F. Haessner*) Dr. Riederer-Verlag GmbH, Stuttgart, 1978. p.
5. *A. H. Cottrell*, Report of a Conference on the Strength of Solids, Physical Society, London, 1948. p. 30.
6. *D. McLean*, Grain Boundaries in Metals, University Press, Oxford, 1957. p. 118.
7. *E. D. Hondros and M. P. Seah*, Int. Met. Rev. *22*, 262, 1977.
8. *Brunauer et al.*, J. Am. Chem. Soc. *60*, 309, 1938.
9. *M. P. Seah and E. D. Hondros*, Proc. Roy. Soc. *335A*, 191, 1973.
10. *D. Graham*, J. Phys. Chem. *57*, 665, 1953.
11. *M. P. Seah and C. Lea*, Phil. Mag., *31*, 627, 1975.
12. *R. H. Fowler and E. A. Guggenheim*, Statistical Thermodynamics. University Press, Cambridge, 1939. p. 429.
13. *M. Guttman*, Surface Sci., *53*, 213, 1975.
14. *M. Guttman*, Metal Sci., *10*, 337, 1976.

A PLAZMASZÓRÁS FIZIKAI ALAPJAI*

SÁRAY ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék

1. BEVEZETÉS

A plazmaszórás a lángszórás régóta ismert technológiájának továbbfejlesztett változata. A plazmaszórás célja olyan felületi réteg létrehozása alkatrészeken, tárgyakon, amely előnyös tulajdonságokat eredményez, pl. kopásállóság, korrózióállóság, jó elektromos vagy hőszigetelő képesség, de alkalmazzák felületi hibák kijavítására is.

A lángszórással szemben a plazmaszórásnak jelentős előnyei vannak, ilyen pl. a munkaközeg nagyobb hőmérséklete, amely lehetővé teszi gyakorlatilag minden olyan anyag felszórását, amelynek egyáltalán van stabil folyadék állapota, és ilyen az is, hogy a plazmát alkotó gázközeget tetszőlegesen a kívánalmaknak megfelelően lehet megválasztani, mert a plazmaláng létrehozásához nincs szükség kémiai reakcióra.

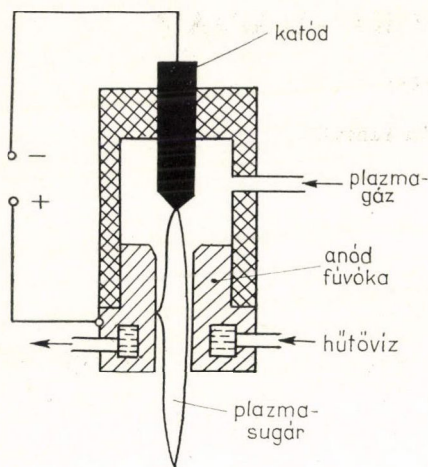
A plazmaszórás technológiája a 60-as évektől kezdve főképpen empirikus alapon fejlődött. Hosszú ideig nem volt, és bizonyos vonatkozásokban máig sincs kellően tisztázva a por felmelegedésének és a rétegképződésnek a mechanizmusa, valamint nem ismerték, illetve nem ismerik pontosan azokat a tényezőket sem, amelyek a réteg tapadását és szerkezetét megszabják. Ennek az az oka, hogy ezek a folyamatok olyan magas hőmérsékleteken és olyan rövid idő alatt zajlanak le, amelyek kellően részletes kísérleti vizsgálatához csak az utóbbi években nyílt meg a lehetőség. Az alábbiakban a plazmaszóráskor fellépő fizikai folyamatokról kívánunk áttekintést nyújtani.

2. PLAZMASUGÁR GENERÁTOROK

A plazmasugár generátorok többnyire stabilizált egyenáramú ív segítségével állítják elő a plazmasugarat. A stabilizálás azt jelenti, hogy — ellentétben a szabadon égő ívvel —, az elektródák anyagának és alakjának időbeli változatlanóságáról mesterséges hűtéssel gondoskodnak és az ívplazma kiterjedését, mozgását, energiaház-tartását, kémiai összetételét ellenőrzik, szabályozzák. A plazmasugár generátor leggyakoribb típusának sematikus rajzát az 1. ábrán láthatjuk.

Az ív a generátor tengelyében elhelyezkedő, rúd alakú katód csúcsa és a koaxiálisan elhelyezkedő, fúvóka alakúra kiképzett anódcső belső felülete között, a katód felől beömlő gázáramban „ég”. Az ív katódoldali talppontja többé-kevésbé helyhez kötött, az anódoldali vége azonban a gázfúvás hatására állandóan változtatja a helyét,

* Érkezett 1983. szeptember 2.



1. ábra. A plazmasugár generátor elvi vázlata

és helyes működés esetén az anódfolt ki-tüntetett tartózkodási hely nélkül, egyenle-tesen pásztázza végig a fúvókacső belső fe-lületének nagyobb részét. Ennek köszönhe-tően az anód átlagos hőterhelése még elvi-selhető maradhat és az anód anyaga nem károsodik.

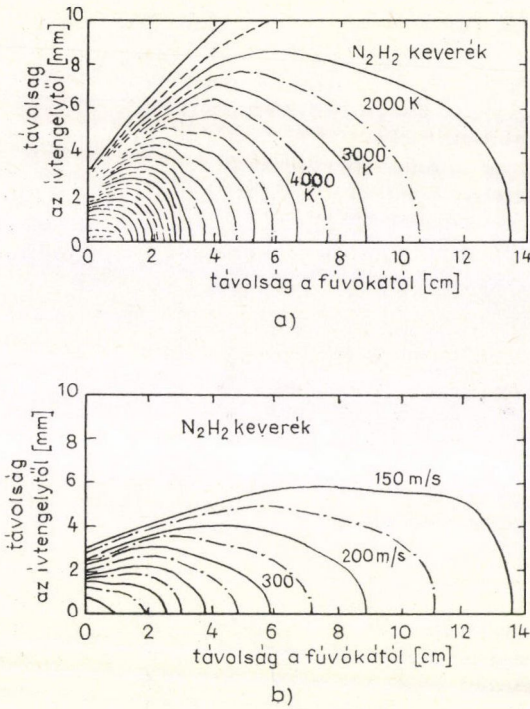
Az anód jelentős energiát vezet el, a teljes betáplált villamos teljesítmény 50—60%-át. A katód hőterhelése sokkal kisebb, mint az anódé, és rendszerint csupán 5—10%-ot tesz ki [1]. Magas olvadáspontú fémek (W, Mo) vagy grafit alkalmazása esetén ez a hő elvezethető és nem okozza a katód anyagának károsodását. Megjegyzendő, hogy a katód és az anód anyagá-nak működés közbeni változatlanlansága csak közelítőleg igaz. A valóságban még a leg-intenzívebb hűtés sem elegendő arra, hogy

teljesen kiküszöbölje az elektródák fogyását. Élettartamuk rendszerint néhányszor tíz óra. Ennek az oka az, hogy az elektródák közelében az áramsűrűség nagyon nagy, és ezt a hőterhelést az elektróda anyaga csak nagyon rövid ideig képes elviselni megol-vadás, párolgás nélkül. Megfigyelések szerint például az anódfolt mozgása az anód felületén korántsem egyenletes és így az anód bizonyos helyeken túlmelegedhet [2].

Az anódfoltnak az áramlás irányában végzett pásztázó (és végeredményben játékony hatású) mozgásának az a magyarázata, hogy az áramvezető ívcsatorna, mint az áramló gáz része nagy, néhány száz m/s-os sebességgel halad kifelé, és ezzel egyidejűleg az ívfeszültség az ív hosszabbodásának arányában nő. Eközben azonban az ívcsatorna oldalirányban is terjeszkedik, azaz melegszik és ionizálódik a falközeli, eredetileg hidegebb gázréteg is egészen addig, amíg villamos átütés következik be a fúvókának egy, a katódhoz közelebb eső pontján. Innen a folyamat a leírt módon is-métlődik. Az ismétlődési frekvencia néhány ezer Hz. Ebből a tényből következik, hogy a plazmasugár nem lehetne egy szabályosan áramló közeg még akkor sem, ha egyébként teljesülnének a lamináris áramlás feltételei.

Különleges körülmények között azért lamináris plazmasugár is megvalósítható az ívplazmagenerátorban [3]. Ha a gázáramlás sebességét jelentősen lecsökkentjük, akkor egy bizonyos értéktől kezdve megszűnik a plazmaláng lüktetése, amit a szoká-sos erős sistergés teljes elhalkulása is jelez, és a láng nagymértékben meghosszabbod-ik. Az ily módon előállított lamináris plazmasugár hőmérséklete jelentősen alacson-nyabb, mint a turbulensé, és megfigyelhető a lángnak elektróda gőzök miatti színe-ződése is. Az ívplazma magas hőmérsékletű zónái a fúvóka belsejében maradnak, az anódfolt helyhez kötött, és amit kívül látunk az csupán az ívplazma külső szegélye. A lamináris plazmasugárnak a plazmaszórás szempontjából gyakorlati jelentősége nincs.

Az ilyen különleges esetekből eltekintve a stabilizált ívplazmasugarat úgy tekint-hetjük, mint egy olyan kaotikusan lüktetve áramló, magas hőmérsékletű, részben ionizált gázsugarat, amelynek hőmérséklete és sebessége egy adott helyen, időben több ezer Hz frekvenciával ingadozik. A hőmérséklet és sebesség időbeli átlagaira



2. ábra. A plazmasugár hőmérséklet és sebességeloszlása

a 2a és b ábrák mutatnak példát [4]. Megfigyelhető, hogy mindkét paraméter erősen változik a plazmasugár keresztmetszetében sugárirányban, és néhány mm-es távolságon belül a hőmérséklet 10 000 kelvint is változik. A sebességnek hasonlóan jelentős változásai vannak. A plazmasugár magjának hőmérséklete 10–15 ezer K ionizáció foka 1 % körül van. A beömlő hideg gáz sebessége 5–10 m/s, maximális kiömlési sebessége 300–500 m/s.

A tengelyszimmetrikus plazmasugár közelítő leírására a Navier–Stokes egyenleteket alkalmazhatjuk, kiegészítve a kontinuitási és az energiamérleg egyenlettel:

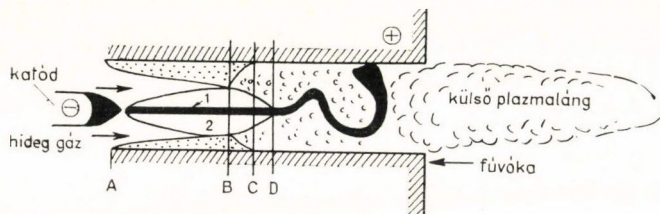
$$\rho u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + \rho u_r \frac{\partial u_x}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial x} + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u_x}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u_r}{\partial x} \right),$$

$$\rho u_x \frac{\partial u_r}{\partial x} + \rho u_r \frac{\partial u_r}{\partial r} = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u_r}{\partial x} \right) + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu r \frac{\partial u_r}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u_x}{\partial r} \right) - \frac{2\mu u_r}{r^2},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho u_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\rho r u_r) = 0,$$

$$\rho u_x \frac{\partial h}{\partial x} + \rho u_r \frac{\partial h}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\kappa}{c_p} \frac{\partial h}{\partial r} \right) - S + jE - Q,$$

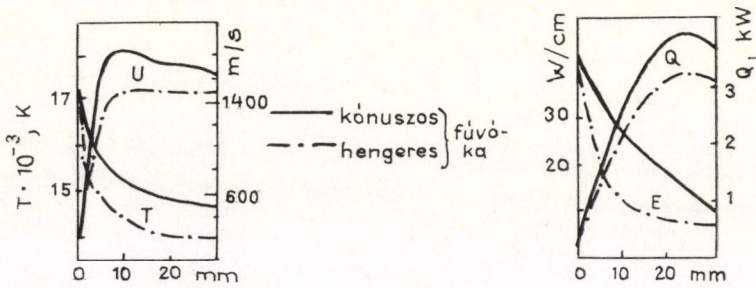
ahol ρ a tömegsűrűség, u a sebesség, μ a viszkozitás, h az entalpia, κ a hővezetőképesség, c_d a fajhő állandó nyomáson, S a sugárzási veszteség, j az áramsűrűség, E az elektromos térerősség, Q a plazmasugárban jelenlevő hőelnyelők hatását veszi számításba, amilyen pl. egy bevezetett porrészecske. Feltesszük, hogy a plazmasugár az X tengelyre szimmetrikus helyzetű és az ívplazma saját mágneses tere nem nagy. A fenti egyenleteknek számos közelítő megoldása ismeretes [5–8], amelynek részletes ismertetésére e cikk keretein belül nem vállalkozhatunk. A legtöbb megoldás Prandtl határréteg elméletét használja fel. A határréteg alapgondolatának segítségével a következőképpen vázolhatjuk a plazmotron csatornában fellépő folyamatokat.



3. ábra. Az ívcsatorna vázlata

A fúvókába az „A” katódoldali végén (3. ábra) belépő hideg gáz áramlása lamináris, vagy enyhén turbulens. Az ábrán sötéttel jelzett „1” áramvezető ívoszlopot kúposan körülveszi a 2-es, ún. hővezetési tartomány. Ez a gáznak az a része, amely hővezetés útján melegedett fel az ívcsatornában fejlődő hőtől. A fúvókaszűkület peremétől ugyanakkor elindul egy határréteg, amely a fal hatását közvetíti az ívcsatorna belseje felé. E két határréteg a „B” keresztmetszetben találkozik. A felmelegedett gáz jelenléte lényegesen megváltoztatja a határréteg paramétereit, mivel többek között a μ viszkozitás is függ a hőmérséklettől. A „C” keresztmetszetben a hővezetési tartomány eléri a fúvóka falát. Eddig a pontig a fal csupán sugárzással kapott energiát, innen kezdve viszont fellép az a hőáram is, amely az ívtől jön hővezetés és konvekció útján. A „D” keresztmetszetben a határréteg eléri az ívcsatornát. Ha ez a határréteg turbulens, akkor ettől a ponttól kezdve az ívcsatorna átmegy kaotikus mozgásba. Ennek során az ív áramvezető szakasza időnként olyan közel kerülhet az anódként szolgáló ívcsatorna falához, vagy az ívcsatorna két szakasza egymáshoz, hogy átütés következik be, és új ívcsatorna képződik. A plazmaláng pulzálásának azonban nem a határréteg turbulenciája az elsődleges oka, hiszen az átütésnek és az ívrövidülésnek a határréteg felmelegedése az előidézője, de hozzájárul a pulzálás szabálytalan jellegéhez. A 4. ábrán bemutatjuk néhány paraméter tengelymenti változását az ívcsatorna belsejében számítási eredmények alapján [5]. Ezek és a hasonló eredmények lehetővé teszik egyebek között azt, hogy megértsük, és a tervezésnél figyelembe vegyünk a plazmagenerátor egyes jellemzőinek pl. geometriai méreteinek, anyagának, a gázadagolási sebességnek, elektromos teljesítménynek, stb. hatását a plazmasugár paramétereire. A fúvóka átmérőjének lényeges hatását mutatják pl. a plazmasugár Elenbaas–Heller-féle egyszerűsített modellje alapján, különböző plazmasugárkeverékekre végzett számítások [9]. A modell szerint a plazmasugár tengelyében a fúvóka torkolati részén a hőmérsékletet az alábbi képlet adja meg:

$$T = T_{\text{fal}} + I^2 / 4\pi^2 \kappa \sigma R.$$



4. ábra. A plazmasugár néhány paraméterének változása az ívtengely mentén

Itt σ és κ a plazma átlagos elektromos, illetve hővezető képességét, R pedig a fúvóka sugarát jelenti. Az 1. táblázat néhány számított értéket ad meg $Ar-H_2$ és N_2-H_2 gázkeverékekre.

Jelentős szerepe van annak, hogy a port a plazmasugárba hogyan és hol vezetjük be. Ettől függ ugyanis pl. az, hogy a por milyen egyenletesen és milyen hatásokkal melegszik fel, általában milyen plazmakezelést kap. Ha a cél az, hogy minél nagyobb legyen a porrészecskék hőkezelési ideje, akkor célszerű a részecskéket már a katód közelében bejuttatni. Ez nem könnyű feladat, mert az ívkamra belsejében a kavargó por jelenléte nagy zavart okoz, és nehéz pl. azt megakadályozni, hogy az ívkamra belseje vagy a fúvóka csatornája rövid idő alatt el ne tömődjék a megolvadt porszemcséktől. Ezért az ilyen típusú generátorok jelenleg még nem terjedtek el az iparban.

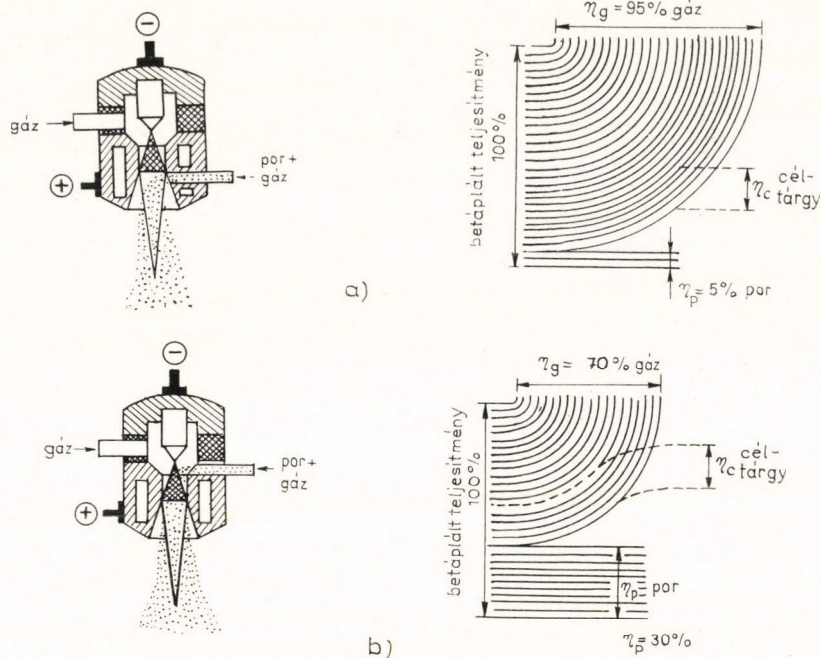
A por bevezetésének a helye leggyakrabban a fúvóka kiömlő nyílásának a közelében van. Ez technikailag igen egyszerű megoldás, a por jelenléte nem zavarja a generátor működését, azonban figyelemmel kell lennünk a plazmasugár említett keresztirányú inhomogenitására, aminek következtében a porrészecskék igen különböző plazmakezelést kaphatnak „egyéni” trajektóriájuktól függően. A plazmasugár kihasználtsága itt kisebb az előző porbeadagolási módhoz képest.

Összehasonlítva a plazmasugár teljes energiájának megoszlását a két esetben (5. ábra), azt látjuk, hogy ugyanakkora betáplált teljesítmény esetén kb. hatszor több energia fordítódik a por melegítésére, ha azt a katód közelében adagoljuk be [10].

A plazmaközeg anyagi minőségének a plazmában lejátszódó kémiai és fizikai folyamatok szempontjából van szerepe. Az elektródák védelme általában megkívánja semleges vagy redukáló gázok alkalmazását. A leggyakrabban alkalmazott gázkeverékek az $Ar-H_2$ és az N_2-H_2 . A H_2 szerepe nem csupán a redukáló atmoszféra megteremtése, hanem a hővezetőképességnek és a gáz entalpiájának növelése is.

1. TÁBLÁZAT

2 R [mm]	$Ar-H_2$ [K]	N_2-H_2 [K]
2,5		26 300
3	29 100	19 600
3,5	21 700	14 000
4	16 850	10 800
4,5	13 500	8 800
5	11 140	7 300



5. ábra. A betáplált elektromos teljesítmény megoszlása a plazmasugárban különböző porinjektálási módoknál

3. A PORRÉSZECSKÉK MOZGÁSA A PLAZMASUGÁRBAN

A plazmaszórás céljára felhasznált por tipikus részecskemérete 30—150 μm .

A porrészecskék mozgásának ismerete a plazmában rendkívül fontos, hiszen ez határozza meg azokat a fizikai és kémiai hatásokat, amelyek a porrészecskéket érik a plazmasugárban. A mozgás leírásához pedig az erőket kell ismernünk.

Ha első lépésként a plazmasugarat homogén és izoterm közegnek és benne a porrészecskék mozgását stacionáriusnak gondoljuk, akkor a fellépő leglényegesebb erőhatás a jólismert közegellenállás (amely természetesen a relatív sebesség irányától függően gyorsítólag is hathat).

Ha — további egyszerűsítésként — a részecskét pontos gömbnek vesszük, akkor a Navier—Stokes egyenletek megoldásaként a $6\pi\mu v r$ erő kifejezést kapjuk, amely a $0 < \text{Re} < 0,1$ határok között érvényes.

Az Oseen által korrigált Stokes kifejezés $\text{Re} \sim 1$ -ig adja meg helyesen a részecskére ható erőt:

$$F_k = 6\pi\mu v \cdot r [1 + (3/16) \text{Re}].$$

Pontosabb korrekciók kb. $\text{Re} \sim 10$ -ig terjesztik ki a Re számok szerinti sorfejtés alakjában megadható erő kifejezés érvényességét [11]:

$$F_k = 6\pi\mu v \cdot r [1 + (3/16) \text{Re} - 1,1 \cdot 10^{-2} \text{Re}^2 + 9,5 \cdot 10^{-5} \text{Re}^3].$$

$Re > 10$ esetén az áramlás már nem stacionárius, az erő kifejezés is ennek megfelelően időfüggővé válik, előbb periodikusan, majd kaotikusan ingadozik. Az átlagértékekre azonban általános formulát adhatunk meg az ellenállási tényező segítségével

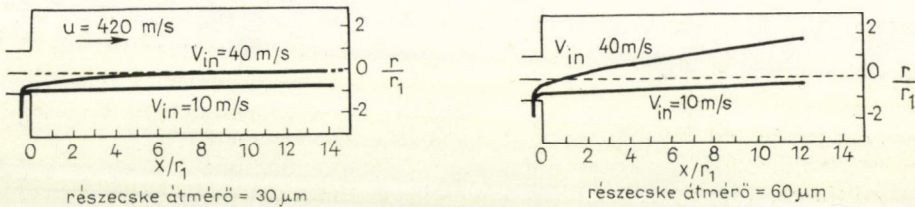
$$F_k = C \cdot r^2 \pi \cdot \varrho v^2$$

ahol a C ellenállási tényező függése a Reynolds számtól tapasztalt görbékéből ismert [12]. Plazmasugár esetében a Reynolds szám értéke a szokásos részecskeméreteknél 0,2 és 20 között van.

Ha a közeg nem homogén, akkor újabb erőhatások lépnek fel. A hőmérséklet gradiens hatását írja le az alábbi kifejezés [14]:

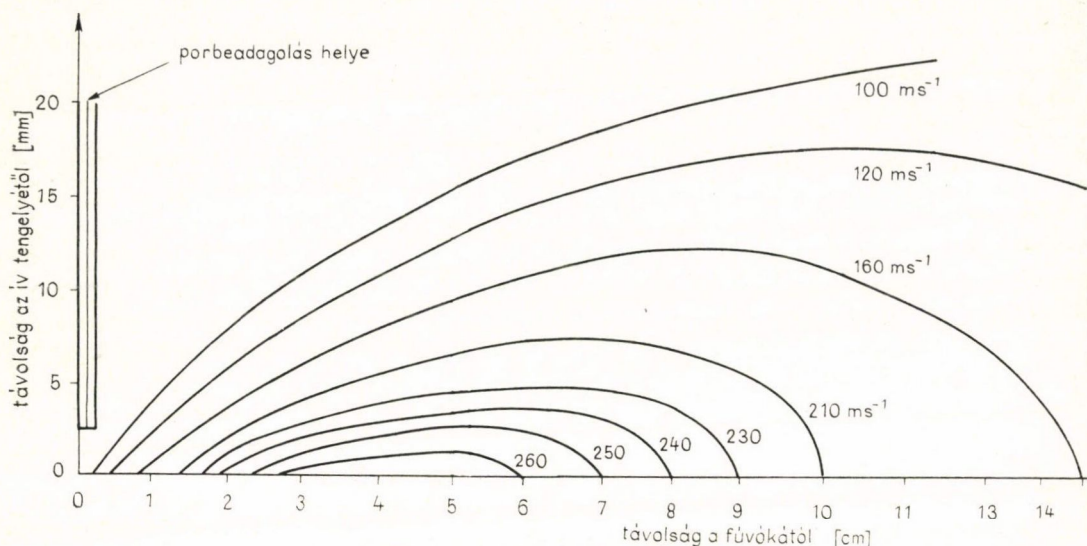
$$F_T = -18\pi^2 \frac{\mu}{\varrho T} r \left[\frac{1}{1 + 2c_m(\lambda/r)} \right] \cdot \left[\frac{(\kappa_g/\kappa_r) + c_t(\lambda/r)}{1 + 2(\kappa_g/\kappa_r) + 2c_t(\lambda/r)} \right] \text{grad } T,$$

ahol κ_g , κ_r a hővezetőképességek a gázban, ill. a részecskében, λ a molekulák szabad úthossza, $C_m = 1,13$ és $C_t = 2,16$ 1 atm nyomású argon gázra, T a gáz hőmérséklete. Elektromágneses jellegű inhomogenitások hatását is figyelembe kell vennünk olyan helyeken, ahol az áramsűrűségek igen nagyok, pl. az elektródák közelében. Fellépnek még erőhatások a részecskék és a plazma között anyagcsere folyamatok következtében, aminek a hatása igen jelentős lehet, azonban matematikai leírásuk igen nehéz a folyamatok véletlenszerűsége miatt [15].



6. ábra. Porrészecsképekályák plazmasugárban merőleges befúvás esetén

Egyes részecskék trajektóriáját vizsgálta kísérletileg *Boulos és Gauvin* [16]. A részecskéket a plazmasugár generátor fúvókájának torkolatánál injektálták be különböző részecskeméretekké és sebességekkel és a tengelyhez képest különböző belépési szögekkel. A 6. ábrán bemutatott eredmények szerint csak a részecskeméret és a belövési sebesség megfelelő összehangolása mellett haladnak a részecskék a tengelyhez közeli, megfelelő pályán. Abban az esetben, ha a részecskék méretkülönbségei nagyok a porban, nem is várhatjuk, hogy a részecskék mindegyike megfelelő kezelést kap. A részecskék sebességterének kísérletileg felvett izofluxus görbéit mutatjuk be a 7. ábrán [17]. Ezek a mérések igen jól definiált méretű Al_2O_3 részecskékkal történtek ($2r = 18 \pm 2 \mu\text{m}$).



7. ábra. Porrészecskék sebességeloszlási görbéi

4. A PORRÉSZECSKÉK FELMELEGEDÉSE A PLAZMASUGÁRBAN

A plazmasugár magas hőmérséklete ellenére nem könnyű feladat a porrészecskéket egyenletesen és tökéletesen megolvadt állapotba hozni. Ennek oka egyfelől az, hogy a részecskéknek a plazmában való tartózkodási ideje kicsi [10], ami bizonyos esetekben kevés a hőátadási és átmelegedési folyamatok időigényéhez képest. Másfelől a plazmasugár erős inhomogenitásának következtében nehéz elérni, hogy a plazmába bevitt összes pormennyiség megkapja a szükséges hőkezelést.

Az energiaátadás a plazmától a részecske felé atomok, ionok, elektronok diffúziójával történik, amelyek kinetikus, ionizációs és disszociációs energiát szállítanak a részecske felé. Számolnunk kell a felület esetleges párolgásával és kémiai reakciókkal is a plazma és a részecske anyaga között. Makroszkópos szempontból konvektív hőátadás történik, ha a sugárzás hatásától, mint kis járuléktól eltekintünk.

A részecskéknek átadott hőmennyiség

$$\delta Q = \alpha(T_g - T_r)\delta t$$

annál nagyobb, minél nagyobb az α hőátadási tényező és a T_g plazmahőmérséklet, valamint minél nagyobb a plazmában való tartózkodási ideje a vizsgált részecskének. Vizsgáljuk először a hőátadási tényezőt. A dimenzióanalízist plazma körülményekre alkalmazva [18] általánosan felírhatjuk, hogy:

$$Nu = f(Pr, Re, Sc, \zeta).$$

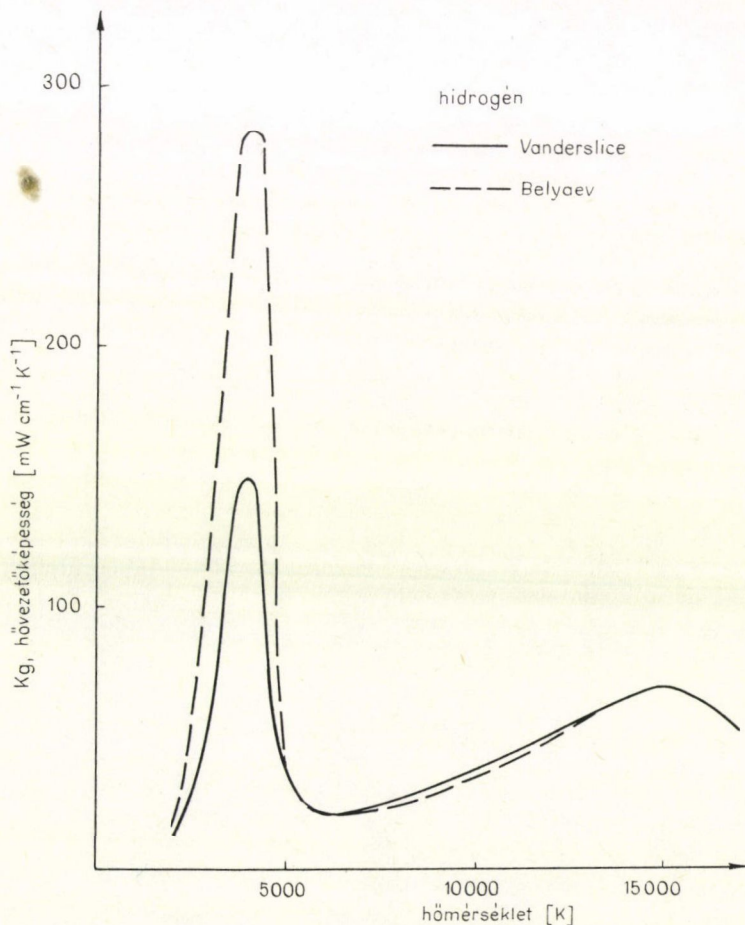
ahol Nu a Nusselt szám, Pr a Prandtl szám, Sc a Schmidt szám és ξ az ionizáció foka. Az egyik leggyakrabban használt közelítő összefüggés a következő [19]:

$$Nu = 2 + Re^m Pr^n,$$

ahol az első tag a hővezetést (v kicsi), a második tag a konvektív hőátadást írja le. A Nusselt szám definíciójából következően a hőátadási tényező:

$$\alpha = \frac{Nu \kappa_g}{d}.$$

Itt κ_g a gáz hővezető képessége, d a részecske átmérő. κ_g a plazmában igen erősen változik a hőmérséklettel az ionizációs hatások következtében (8. ábra). Hidrogén esetében pl. κ_g 5000 K közelében néhány száz fokon belül 30-szoros változást szenved.



8. ábra. Hidrogénplazma hővezetőképessége

Emiatt a H_2 plazma hűtadási képessége jóval nagyobb, mint bármely kémiai láng esetében. A hővezetőképesség változások miatt κ_g helyébe valamilyen átlagos értéket írhatunk α kifejezésébe pl.:

$$\bar{\kappa}_g = \frac{1}{T_g - T_r} \int_{T_r}^{T_g} \kappa_g(T) dT.$$

Összehasonlítva a H_2 plazma hűtadását 5000 K felett a H_2-O_2 kémiai láng hűtadásával az előbbi 20-szor nagyobbak adódik.

A másik tényező a tartózkodási idő. Ez függ a plazmasebességtől, amely elérheti az 1000 m/s-ot [20]. A porszemcsék által elért végsebesség függ a szemcse mérettől: néhány μm -es szemcsék esetén a relatív sebesség gyakorlatilag zérus, 100 μm -es részecskeméret esetén $v_{\text{relatív}} \sim 0,1 v_{\text{gáz}}$ — amint az könnyen becsülhető a [10]-ben leírt összefüggések alapján. A plazmasugár kihasználható részének hossza néhány cm, így a tartózkodási idő nagyságrendje 0,1—100 ms.

A részecskék felmelegedési ideje függ a plazma gáz természetétől is és attól, hogy a hőmérséklete kisebb az illető gáz disszociációs hőmérsékletintervallumának felső határánál, vagy nem. Előnyösebb pl. a hűtadási képesség szempontjából a H 5000 K-nél, mint az argon gáz 10⁴ K-en.

Függ a felmelegedési idő a részecske sugarától és fajhőjétől is. Egyébként azonos áramlási viszonyok esetén a részecskék felmelegedési idejét a $\bar{\kappa}/\rho cr^2$ mennyiség szabja meg [21]. Nitrogénben 10⁴ K-en az $r=10 \mu\text{m}$ és az $r=200 \mu\text{m}$ sugarú részecskékre kapott felmelegedési idő között három nagyságrend különbség van. Egy 30 μm sugarú részecske felmelegítéséhez hozzávetőlegesen 10⁻⁴—10⁻² s idő szükséges [10]. A felmelegedési képesség megítéléséhez figyelembe kell venni a belső hővezetést. Előfordulhat ugyanis, hogy a plazma hűtadási képessége nagyon jó, azonban a belső hővezetés lassúsága miatt a részecske nem tud átmelegedni, aminek pl. a felület túlmelegedése, elpárolgása lehet a következménye. A nagyon rossz hővezetésű anyagok esetén előnyösebb lehet kevésbé jó hűtadású plazmagáz alkalmazása.

Arról, hogy a porrészecske teljes átmelegedésében a külső és a belső folyamatok milyen mértékben játszanak szerepet a Biot szám nyújt felvilágosítást:

$$Bi = \kappa_g/\kappa_r.$$

Ha ez a szám kicsi, akkor a belső folyamatok kevésbé lényegesek, ha nagy, akkor pedig pontosan ezek jelentenek korlátozó tényezőt. Az alábbi táblázatban különböző poranyagok, illetve különböző összetételű és hőmérsékletű plazmák Biot számait láthatjuk [10].

Poranyag	A poranyag hővezetőképessége $Vm^{-1} K^{-1}$	kg/kr különböző gázokra			
		Argon (10 ⁴ K)	N ₂ (5000 K)	NH ₃ $\frac{V}{(3500 K)}$	H ₂ $\frac{V}{(3500 K)}$
ZrO ₂	2,39	0,18	0,63	3,5	5,5
Al ₂ O ₃	5,86	0,07	0,26	1,4	2,2
MgO	5,86	0,07	0,26	1,4	2,2
BN	9,2	0,05	0,16	0,9	1,4
SiC	41,9	0,01	0,04	0,2	0,3
Ti	18,0	0,02	0,08	0,5	0,7
Fe	40,0	0,01	0,04	0,2	0,3
W	100,0	0,004	0,015	0,08	0,1

A plazmába beadagolt por mennyisége nem elhanyagolhatóan kevés a plazmagáz tömegéhez képest, ezért általában figyelembe kell venni a por hűtőhatását is a plazmában. Ezt a plazmasugárra felírt energia mérlegegyenletben szereplő Q mennyiségen keresztül tehetjük meg.

Plazmaszórásnál az időegység alatt átáramló gáztömeg és por aránya általában nem nagyobb 5-nél. Ekkor a por beadagolás okozta plazmahőmérséklet és sebességcsökkenés kb. 20–30%-ot tesz ki [10].

5. A FELSZÓRT RÉTEGEK SZERKEZETE ÉS TULAJDONSÁGAI

A plazmaszórással készült rétegek szerkezetének és tulajdonságainak megértéséhez ismerni kell a felmelegedett porrészecskék állapotát közvetlenül a felületre való becsapódás előtt.

Bár a felszórt rétegek adhéziójának mechanizmusát még nem értjük kellően, az kétségtelennek látszik, hogy a jó tapadáshoz és a jó tömörséghez az szükséges, hogy a részecskék becsapódás előtt teljesen átolvadtnak legyenek és sebességük minél nagyobb legyen. Láttuk, hogy a plazmasugárban a lángszóráshoz képest jóval kedvezőbbek a lehetőségek az átmelegedéshez és a nagy becsapódási sebesség eléréséhez azonban a plazmasugár erős inhomogenitása miatt az egyes porszemcsék plazmakezelése általában nem lesz egyforma.

A másik fontos tényező a felszórt rétegek tulajdonsága szempontjából a céltárgy felületének állapota. Megfigyelések szerint [22, 23] még alapos tisztítás után is a felületen igen hamar megtapadnak a levegőből származó aeroszol részecskék, amelyek a becsapódó részecskék közé ékelődve megakadályozzák a jó tapadást.

Fontos tényező a céltárgy hőmérséklete is, amely a megszilárdulási és a lehűlési folyamatokat befolyásolja.

Ha a részecskét teljesen átolvadtnak tételezzük fel, akkor annak a feltétele, hogy a becsapódott csepp jól szétterüljön a céltárgyon az, hogy a Weber szám

$$We = \rho v^2 d / \gamma$$

minél nagyobb legyen és legalább 80 értéket elérjen [24]. Itt ρ az olvadt csepp sűrűsége, v a sebessége, d az átmérője és γ a felületi feszültség.

A Weber szám plazmaszóráskor néhány százra tehető. Kiszámítva a felületre becsapódó részecskék szétlapulásának mértékét, egyszerű sztatikus energiamegfontolások alapján [25] azt kapjuk, hogy

$$D/d = 0,613 We^{0,39},$$

ahol D a szétlapult korong átmérője. Ez az összefüggés a megfigyeltnél sokkal nagyobb értéket ad, ami arra utal, hogy vagy a viszkozitás elhanyagolása nem megengedhető, vagy a megszilárdulási folyamatok korábban elkezdődnek, mint ahogy a szétlapulás befejeződik. *Madejski* [26] a viszkozitás figyelembevételével a szétlapulás mértékére a kristályosodási effektusok elhanyagolásával az alábbi összefüggést kapta:

$$\frac{3(D/d)^2}{We} + \frac{1}{Re} \left[\frac{(D/d)}{1,29} \right]^5 = 1.$$

Feltéve, hogy We és Re nagyobb, mint 100, D/d reális értékeire az első tag elhanyagolható a második mellett, ezért:

$$D/d \cong 1,29 (Re)^{0,2}.$$

Ez az összefüggés Al_2O_3 plazma szórása esetén a kísérletekkel megegyező értékeket ad [27].

A szétterülés mértékének kiszámításánál úgy tűnik tehát, hogy elhanyagolható az, hogy a csepp nedvesíti-e a céltárgyat vagy sem. A tapadás szempontjából azonban bizonyára lényeges a nedvesítés hatása, még akkor is, ha csupán mechanikus tapadást tételezünk fel. Ha ugyanis a csepp nem nedvesíti a szubsztrátumot, akkor van egy minimális méretű pórus, amelybe a csepp már nem tud behatolni, amely a következő kifejezéssel adható meg [28]:

$$D_{\text{pórus}} = 4\gamma \cos \theta / P,$$

ahol θ a nedvesítési szög, P az effektív nyomás a becsapódáskor az érintkezési felületen. Ha $P = \rho v^2$, akkor a kritikus pórusméret Al_2O_3 esetében ($\gamma = 0,68 \text{ J/M}^2$ és $\theta = 180^\circ$ -kal számolva) kb. $0,03 \text{ }\mu\text{m}$.

Jones [29] vizsgálta az olvadt cseppek lehűlését a hideg céltárgyon, és eredményei szerint a lehűlési sebesség nagymértékben független a céltárgy anyagától; a hőátadást a részecske és a céltárgy közötti átmeneti réteg szabja meg, ha a részecske vastagsága kisebb, mint néhány μm . A hőátadási tényező becsült értéke $10^5 \text{ Wm}^{-2} \text{ K}^{-1}$. Ebből a lehűlési sebesség értéke pl. Al_2O_3 esetén 10^7 K/s nagyságrendű, és a megszilárdulási idő kb. $10 \text{ }\mu\text{s}$.

A nagyfelületű érintkezés a szubsztrátummal a megszilárdulás során a heterogén nukleációnak kedvez, azonban a nagy lehűlési sebesség és a kis lehűlő anyagmennyiség a homogén nukleációt részesíti előnyben. Azt, hogy melyik effektus dominál, az dönti el, hogy a kristályosodáskor felszabaduló hő is figyelembe véve hogyan alakul az olvadt csepp hőmérséklete. A nukleáció sebessége ugyanis erősen változik a hőmérséklettel. Ha nagy a felszabaduló hő, akkor kicsi a nukleáció és nagy oszlopos kristályok növekedése várható. Ha azonban az időegység alatt felszabaduló hő kicsi az elvezetett hőhöz képest, akkor a túlhűlés mértéke nő, és apró mikrokristályos szerkezet alakul ki. A mikroszkópos megfigyelések szerint mindkét típusú szerkezet kialakulhat. Wilms és Herman [31] durva oszlopos szerkezetet figyelt meg tiszta Al_2O_3 -ban és finomszemcsés szerkezetet talált Al_2O_3 — Y_2O_3 rétegben.

A felszórt réteg adhéziója talán a legfontosabb tulajdonság, de a tapadási folyamat kielégítő értelmezése mindmáig nincs meg. Egyesek [32] a megtapadást kizárólag mechanikai folyamatnak tekintik, mások a jó tapadáshoz elengedhetetlennek tartják a jó kémiai kötést is [33]. Van olyan álláspont is, hogy kötés létrejöhet sima felületen olyan esetben is, ahol kémiai kötés létrejöttére nem számíthatunk. A különböző álláspontokat képviselő szerzők különböző anyagokkal dolgoztak és valószínű, hogy nem lehet kizárólagosan egyetlen mechanizmussal megérteni a tapadási folyamatot az összes esetben.

A felületi-reakció hipotézist Kudinov [33] és munkatársai dolgozták ki, vizsgálataikat ezüstszemcsékkel végezték. Kimutatták, hogy a kötés erőssége nő a szubsztrátum hőmérsékletének és a becsapódási sebességnek a növekedésével, ami a hipotézist alátámasztani látszik, hiszen ezek csökkentik a felületi aktivációs energiát.

Arra, hogy milyen nehéz valódi fémes kötést létrehozni fémszóráskor, jellemzők azok a kísérletek, amelyek során frissen polírozott wolfram felületre próbáltak felvinni wolfram szemcséket [34]. A szórási kísérleteket közömbös gáz atmoszférában

végezték, mégis amikor a szubsztrátum szobahőmérséklet környékén volt csak, kötés alig jött létre. Epitaxiális növekedést csupán akkor észleltek, amikor a céltárgy hőmérséklete 1300°C fölött volt.

Erős kémiai reakciót figyeltek meg Ni és Al porkeverék szórásakor, amely igen sok szubsztrátum esetén jó tapadást biztosít, és ez valószínűleg az olvadt Ni és Al között fellépő heves exoterm reakciónak köszönhető [35].

Keramikus anyagok fémekre való felszórásakor nem tartják valószínűnek valódi kémiai kötések létrejöttét. Vardelle [36] Al_2O_3 pornak fémes anyagokra való felszórásáról számol be. Felszórás után a rétegekben belső mechanikai feszültségek is felépíhetnek, amelyek lehetnek egyes szemcsék között működő mikroszkópikus léptékűek, vagy pedig az egész rétegre kiterjedő makrofeszültségek. A feszültségek fellépésének oka a hőtágulások különbözősége az alap és a felszórt anyag között. Nagy belső feszültségek a rétegek lehámlását is eredményezhetik, különösen, ha a felület sima, és a kötés nem elég erős. Előfordul a réteg összeroppedése is, ha a felszórt anyag rideg. A kompresszív belső feszültség azonban hasznos lehet, mert a felszórt réteg így a törési szilárdságot növeli. Kompressziós belső feszültségeket mértek acélokra felvitt Al_2O_3 rétegen, míg húzófeszültségeket észleltek nikkelt ötvözet felszórása esetén [37].

A felszórt réteg porozitása általában nem kívánatos, mert nagy mértékben csökkenti a réteg szilárdságát és tapadását, rontja a korrózióállóságot, elektromos szigetelőképeséget. A rétegeképződés előzőleg vázolt mechanizmusa alapján bizonyos porozitás eleve várható, ennek értéke a kísérletek szerint általában 5 és 20% között van.

A porozitás igen kicsiny lehet bizonyos poranyagoknál és anyagkeverékeknél. Pl. TiO_2 , Al_2O_3 —50% TiO_2 , Cr_2O_3 és NiO esetében 4% alatti porozitás érhető el. Spinel, mullit, Al_2O_3 , ZrO_2 esetén 4—8% közötti, de ritka földfém oxidoknál 15% körüli a porozitás.

A porozitást megszabó anyagjellemzők elsősorban a viszkozitás és a felületi feszültség. Adott anyag esetén lényeges tényező a porrészecske mérete, a beesési sebesség és az átolvadás mértéke, illetve az, hogy az egyes porszemcsék milyen mértékben kaptak azonos hőkezelést. Ezeket a tényezőket azonban nehéz elkülönítetten vizsgálni. Egy, a sebességfüggéssel kapcsolatban végzett kísérletben Al_2O_3 szemcséket szórtak nagyon szűk szemcseméret intervallumban ($18 \pm 2 \mu\text{m}$) [17]. A plazmaszórótól 50 mm-re elhelyezett céltárgy esetén, amikor a porrészecske sebessége maximális, a porozitás értéke 11% volt. 75 mm-es céltárgy távolságánál azonban ez az érték 23%-ra nő. Nem lehet tudni viszont, hogy az átolvadás mértéke azonos volt-e mindkét esetben.

A porozitást növelő tényezők között bizonyosan a legfontosabb az, hogy az egyes porszemcsék inhomogén plazmakezelést kapnak. Ugyanis a hideg részekre kerülő, nem kellően megolvadt és kisebb sebességű részecskék részlegesen megtapadva lazítják a felszórt réteg szerkezetét.

ÖSSZEFOGLALÁS

Vázlatosan áttekintettük a plazmaszórás során felmerülő fizikai problémákat, amelyek három főbb csoportba sorolhatók:

1. a plazmasugár előállításával és diagnosztikájával kapcsolatos kérdések,
2. a plazmasugárba bevitt poranyag viselkedésének mechanikai és termodinamikai problémái,

3. a felszórt réteg kialakulásával, szerkezetével és tulajdonságaival kapcsolatos szilárdtestfizikai kérdések.

Ezek a kérdések jelenleg még nincsenek kellően megoldva. A plazmaszórás terén elért eddigi eredmények főként tapasztalati tényekkel kapcsolatosak. A továbblépés a jobb minőségű felszórt réteg és a jobb hatások elérése felé a jelzett fizikai problémák behatóbb vizsgálata útján lesz lehetséges.

IRODALOM

1. *M. Nachman*, Rev. Int. Htes Temp. et Réfract. 10, 65, 1973.
2. *E. R. G. Eckert and E. Pfender*, "Advances in plasma heat transfer", in Advances in Heat Transfer, 4, Academic Press, New York, 1967.
3. *P. Fauchais*, Rev. Int. Htes Temp. et Refract. 5, 71, 1968.
4. *E. Bourdin, A. Vardelle, M. Boulos, P. Fauchais*, Proc. 5th. Intern. Symp. on Plasma Chemistry, 1981 p. 804.
5. *A. B. Topcsiev*, Modelirovanie i metodü rasczeta fizikohimicseszkih processzov 15 nizkotemperaturnoj plazme, Moszkva, Nauka, 1974.
6. *M. F. Zsukov, A. Sz. Korotév, B. A. Urjukov*, Prikladnaja dinamika termiceszskoj plazmü, Nauka, Novoszibirszk, 1975.
7. *M. D. Cowley*, J. Phys. D. Appl. Phys. 7, 2218, 1974.
8. *S. V. Patankar*, Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemphisere Publishing Corporations, 1980.
9. *E. Bourdin*, Belső Report, Laboratoire de Thermodynamique, Limoges, 1978.
10. *N. N. Rykalin and V. V. Kudinov*, Pure and Appl. Chemistry, 48, 229, 1976.
11. *A. Fortier*, Mécanique des suspensions, Masson et C^{ie}, Paris, 1967.
12. *L. D. Landau, es E. M. Lifsic*, Hidrodinamika, Tankönyvkiadó, Budapest, 1980.
13. *A. B. Holland—Batt*, Trans. Inst. Chem. Engrs, 50, 12, 1972.
14. *B. V. Derjagin, J. I. Jalamov*, Topics in Current Aerosol Research, ed. *G. M. Hidy and T. R. Brock*, Pergamon Press, New York, 1972.
15. *P. Eisenklam*, 11th Combustion Symposium 1967.
16. *M. A. Boulos, W. H. Gauvin*, Ca. J. Chem. Eng. 52, 335, 1974.
17. *M. Vardelle, J. M. Baronnet, P. Fauchais*, Rev. Int. Hautes Temp. Réfract. 17, 221, 1980.
18. *I. W. Petrie*, Ph. D. Thesis, University of Minnesota, 1969.
19. *F. Hioshidat, K. J. Akashi*, J. Appl. Phys. 48, 2252, 1972.
20. *M. Vardelle, M. A. Boulos, P. Fauchais*, IEEP 58, 417, 1980.
21. *E. Bourdin, M. A. Boulos, P. Fauchais*, Fundamental Research in Heat Transfer, Symposium V, 30th Canadian Chemical Engineering Conference 1980.
22. *I. Gillespie*, Colloid Sci. 10, 266, 1955.
23. *I. Gallily, V. K. La Mer*, J. Phys. Chem. 62, 1295, 1958.
24. *F. Akao, K. Araki, S. Mori, and A. Myrama*, Trans. Iron Steel Inst. Japan, 20, 737, 1980.
25. *L. H. Wachters, N. A. Westerling*, J. Chem. Eng. Sci., 21, 1047, 1966.
26. *J. Madejski*, Int. J. Heat Mass Transfer, 19, 1009, 1976.
27. *R. Mc Pherson*, J. Mater. Sci. 15, 3141, 1980.
28. *H. L. Ritter, L. C. Drake*, Ind. Eng. Chem., 17, 872, 1945.
29. *H. Jones*, Rep. Prog. Phys. 36, 1425, 1973.
30. *K. Lohberg, H. Müller*, Z. Metallkd. 60, 231, 1969.
31. *V. Wilms, H. Herman*, Thin Solid Films, 39, 251, 1976.
32. *M. Donovan*, But. Wld. J. 13, 490, 1966.
33. *V. V. Kudinov, F. I. Kitajev, A. G. Isidulkó*, Porosk. Metall. 152, 38, 1975.
34. *S. J. Grisaffe, W. A. Spitzig*, Trans. A. S. M. 56, 618, 1963.
35. *D. H. Sitzer*, Metal Prog. 86, 128, 1964.
36. *M. Vardelle*, Thèse de 3^{ème} aycle, Université de Limoges, 1980.
37. *A. Hasni, J. Kitara*, Proc. N. R. J. M., Tokyo, 1966. p. 28.

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1984. I. 20. — Terjedelem: 8,75 (A/5 ív)
84-463 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

MAGYAR
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÖNYVTÁRA

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Kovács István és Vörös György: Kristályhibák kontinuum modelljei</i>	385
<i>Tasnádi P., Juhász A. és Főzy I.: Szemcsehatár szerkezetek geometriai modelljei</i>	427
<i>Juhász A., Tasnádi P. és Főzy I.: Szemcsehatár szerkezetek fizikai modelljei</i>	439
<i>Rajkovits Zsuzsa: Szemcsehatár szegregáció</i>	459
<i>Sáray István: A plazmaszórás fizikai alapjai</i>	471

307.226

✓

IV.

MAGYAR

FIZIKAI FOLYÓIRAT

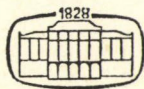
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

GÁSPÁR REZSŐ, KISS DEZSŐ, KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR
ÉS SZALAY SÁNDOR
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI
PÁL LÉNÁRD

XXXII. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
BUDAPEST 1984

MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratszámokról leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Turchányi György egyetemi tanár

Biofizikai Intézet

1444 Budapest VIII., Postafiók 263.

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 90 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21, (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11488), külföldi megrendelések a KULTÚRA Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32, (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmi ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

PIRIMIDIN BÁZISOK EGYENSÚLYI GEOMETRIÁJÁNAK, ERŐTERÉNEK ÉS INFRAVÖRÖS SZÍNKÉPÉNEK SZÁMÍTÁSA A CNDO/2 ERŐMÓDSZERREL*

HARSÁNYI LÁSZLÓ

MTA Természettudományi Kutatólaboratóriumai, Budapest

TARTALOM

Bevezetés	487
I. Elméleti alapok	488
I.1. Molekulák rezgőmozgása klasszikus mechanikai közelítésben	488
I.1.1. A molekularezgések leírása belső koordináták segítségével	488
I.1.2. A molekularezgések leírása normálkoordináták segítségével	490
I.1.3. A molekularezgések leírása szimmetriakoordináták segítségével	491
I.2. Molekulák rezgőmozgásának kvantummechanikai leírása	492
I.2.1. A harmonikus oszcillátor	492
I.2.2. Molekulák normálrezgései	493
I.2.3. A molekularezgések számításához szükséges erőter (F) direkt, kvantummecha- ikai meghatározásának elve	494
I.2.3.1. Molekulák energiája. A Born—Oppenheimer-féle közelítés	494
I.2.3.2. Az energia számítása függetlenrészcseke-moddal	495
I.2.3.2.1. A CNDO-közelítésben alkalmazott egyszerűsítések	496
I.2.3.3. Az erőmódszer	497
I.3. Molekulák kölcsönhatása az elektromágneses sugárzással. Infravörös- és Raman-szín- képek	498
I.3.1. Az EMS abszorpciója	499
I.3.2. Az EMS diszperziója	500
I.4. Egyensúlyi geometriaszámítás a CNDO/2 módszerrel	500
I.4.1. A direkt módszer	501
I.4.2. A „léptetési” módszer	501
I.4.2.1. A módszer ismertetése	501
I.4.2.2. A Nalewajski-féle változat	501
I.4.3. Az erőrelaxációs módszer	502
I.5. Molekulák erőtere és rezgési színeképe kvantumkémiai számításának menete. Illesztés a kísérleti adatokhoz	502
I.5.1. A színeképszámítás menete	502
I.5.2. Skálafaktorok, illesztés	504
II. Irodalmi áttekintés	505
II.1. A DNS, RNS sugársérülése, a pirimidin bázisok fotokémiai reakciója	505
II.1.1. Kísérleti körülmények	505
II.1.2. Fizikai—kémiai vizsgálati módszerek	507
II.1.2.1. A módszerek felsorolása	507
II.1.2.2. A rezgési spektroszkópia alkalmazása	507
II.1.3. Szerkezet	508
II.1.3.1. A piridin bázisok szerkezete	509
II.1.3.2. A fotodimerek szerkezete	509
II.1.4. A fotokémiai reakció	510
II.2. Az uracil kísérleti rezgési színeképe irodalma	511

* Érkezett 1982. jún. 2.

Egyetemi doktori értekezés — 1981.

III. Célkitűzés	514
IV. Eredmények	515
IV.1. A piridin síkbeli erőterének és rezgési színeképének számítása	515
IV.1.1. A piridinmolekula erőtere	517
IV.1.2. A piridin és deuterált származékainak infravörös színeképe. A rezgések besorolása	520
IV.2. Az uracil egyensúlyi geometriájának, erőterének és rezgési színeképének meghatározása	525
IV.2.1. Előzetes megjegyzések	525
IV.2.2. A maleinimid (MIM) és az uracil (U) egyensúlyi geometriájának számítása ..	527
IV.2.3. Az uracil korrigálatlan CNDO-erőtere	531
IV.2.4. Az uracil erőterének korrekciója	532
IV.2.4.1. A korrekcióhoz használt skálafaktorok meghatározása a maleinimid kísérleti és számított színeképe alapján	532
IV.2.4.1.1. A maleinimid erőtere és rezgési színeképe	532
IV.2.4.1.2. A maleinimid skálafaktorai	537
IV.2.4.2. Az uracil korrigált erőtere	540
IV.2.5. Az uracil rezgési színeképe	541
IV.2.6. Az uracil-gőz kísérleti színeképe, a színekép besorolása. Összehasonlító, ellenőrző számítások a kísérleti színekép alapján	542
IV.2.6.1. Az uracil-gőz kísérleti (IR) színeképe	542
IV.2.6.2. A MIM-skálafaktoraival számított elméleti uracil-színekép összehasonlítása a kísérleti uracil színeképpel.	543
IV.2.6.3. Az uracil és a maleinimid közös illesztése	547
IV.2.6.4. Az uracil kísérleti színeképe alapján végzett független színeképszámítás eredménye	551
IV.2.6.5. A skálafaktorok transzferálhatósága	553
IV.2.6.6. A maleinimid elméleti színeképének számítása az uracil skálafaktoraival segítségével. A maleinimid besorolásának módosítása	554
IV.2.6.7. Az uracil szilárd és gázfázisú színeképének összehasonlítása	558
V. Az uracil és származékainak fotokémiai reaktivitása	561
V.1. A módszer elve	561
V.2. Az uracil és származékai fotokémiai reaktivitásának kvantumkémiai jellemzése	562
Összefoglalás	565
Irodalom	566
Függelék	571

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönettel tartozom Dr. Tarján Imrének, az Akadémia rendes tagjának, Dr. Székely Tamásnak a kémiai tudományok doktorának, az MTA Természettudományi Kutatólaboratóriumai igazgatójának és Dr. Dobos Sándornak, a kémiai tudományok kandidátusának, az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriuma Spektroszkópiai Csoportja vezetőjének, amiért figyelmemet a témára irányították, illetve lehetővé tették, hogy rajta dolgozhassak.

Megkülönböztetett hála illeti Dr. Császár Pált, az ELTE Általános és Szervetlen Kémiai Tanszékének adiunktusát, aki konzultációval, tanácsaival, kooperatív tevékenységével és kritikai észrevételeivel munkám eredményességét nagyban elősegítette.

Végezetül köszönöm Raksányi Kundnak, az MTA Kristályfizikai Kutatólaboratóriuma tudományos munkatársának, hogy megismertetett a fotokémiai reaktivitás kvantumkémiai jellemzésével és eredményeinek felhasználásához hozzájárult. Az általa kidolgozott számítási módszer uracilszármazékokra történő alkalmazását tartalmazza az V. fejezet.

BEVEZETÉS

A biológiaiailag aktív vegyületek, illetőleg a bioregulációs folyamatok vizsgálatát célzó kutatások országosan kiemelték. E területre esik a DNS, valamint az RNS ultraibolya sugárzás hatására bekövetkező genetikus sérülésének tanulmányozása is.

A sugársérülés jó modellje a pirimidin bázisok vékonyrétegeiben $\lambda=254$ nm-es ultraibolya fény hatására bekövetkező fotodimerizáció. Egyfelől a vékonyrétegekben a karakterisztikus molekulatávolságok jól egyeznek a biológiai rendszerekben található molekulatávolságokkal (1. ábra), másrészt e rendszerek nem tartalmaznak vizet, s így vizsgálhatók infravörös spektroszkópia segítségével is. A munka széles körű kooperációban, a SOTE Biofizikai Intézete, az MTA Kristályfizikai Kutatólaboratóriuma, az ELTE Általános és Szervetlen Kémia Tanszéke és az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriuma részvételével folyt. A munkamegosztásban a szerzőnek az infravörös analízisben felhasznált elméleti, kvantumkémiai számítások jutottak. A jelen dolgozat ezeket a számításokat részletezi.

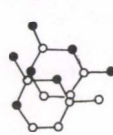
A kvantumelméleten alapuló kvantumkémiai számítások megjelenésük óta (Heitler—London, 1928.) segítik a kémiai reakciók értelmezését, a tapasztalatokon alapuló szabályok magyarázatát. A kvantumkémiai módszerek különösen az utóbbi két évtizedben terjedtek el, amikor a nagy teljesítményű elektronikus számítógépek korábban elvégezhetetlen mennyiségűnek tartott számítások kivitelezésére váltak alkalmassá: több száz elektront tartalmazó rendszerek kvantitatív tárgyalása vált lehetővé a nemrelativisztikus Hamilton-operátor figyelembevételével úgy, hogy a magok és elektronok töltésén és tömegén, valamint a Planck-állandón kívül más tapasztalati adatot nem használnak fel, és az integrálszámítások során nem alkalmaznak elhanyagolásokat (*ab initio* módszer).

Ezen igen költséges módszer mellett különféle közelítő módszereket is kidolgoztak, amelyek az elektronok, s a mátrixelemek egy részének elhanyagolásával, az integrálok közelítő számításával és tapasztalati adatok felhasználásával a számítást úgy egyszerűsítik, hogy az eredmény nem romlik számottevően. A dolgozatban bemutatott eredmények az egyik legelterjedtebb ilyen félempirikus módszer, a CNDO-közelítés felhasználásával készültek.

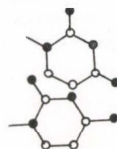
A kvantumkémiai számításokat különféle célokra lehet használni. Geometria optimalizációval molekulák egyensúlyi geometriája számítható; a színképszámítások az empirikus színkép-értelmezések mélyebb megértéséhez, az erőállandósámítások a molekulán belüli kötések természetének megértéséhez segítenek hozzá.

A dolgozatban röviden ismertetjük a molekularezgések problémáját, majd az energiafelületek számításához használt CNDO/2 kvantumkémiai közelítést és az erőmódszert, amelynek felhasználásával a molekulák erőtere számítható ki. Külön fejezet foglalkozik az egyensúlyi geometria számításával, amely a rezgési színképek számításának kiinduló lépése. A színképszámítás elvének bemutatása után kerül sor az alkalmazásokra.

Előbb a legegyszerűbb nitrogéntartalmú hexaciklus, a piridin rezgési spektrumát számítottuk ki. Ennek célja az volt, hogy képet kapjunk a számítási módszer nitro-



kristály
 $d = 332$ pm



RNS
 $d = 317-336$ pm

1. ábra. Uracilmolekulák karakterisztikus távolsága és elhelyezkedése a kristályban, illetve az RNS-ben

géntartalmú heterociklusokra történő alkalmazhatóságáról. Számításaink alapján az irodalomból ismert spektrumbesorolás módosítására tettünk javaslatot néhány alaprezgés esetében.

Ezután került sor az RNS-ben előforduló pirimidin-bázis, az uracil rezgési frekvenciáinak kiszámítására. Amellett, hogy eredményeink nagyban segítették a mátrixizolációs, illetve gőzspektrum asszignációját, összehasonlításuk a polikristályos felvétellel [1] megmutatta azt is, hogy a vékonyrétegben lejátszódó fotodimerizációt az uracil topokémiai környezete milyen mértékben befolyásolja.

Végezetül az utolsó fejezetben utaltunk arra, hogyan használhatók fel a CNDO/2 számítások eredményei további reakciókinetikai számításokhoz, amelyek eredményei a fotokémiai reaktivitást kvantumkémiai jellemzőkkel jósolják meg.

I. ELMÉLETI ALAPOK

I.1. Molekulák rezgőmozgása klasszikus mechanikai közelítésben

A molekularezgések csatolt oszcillátorok rezgéseiként foghatók fel, s így az egyszerű anyagi rendszerek rezgéseire levezetett összefüggések a molekularezgésekre is alkalmazhatók. Az egy- és több szabadsági fokú rezgésekre vonatkozó alapfogalmak és alapösszefüggések, valamint utóbbiak levezetése *Gabillard* [2], illetve *Landau és Lifsic* [3] tankönyveiben megtalálhatók, ezekre itt nem térünk ki.

I.1.1. A molekularezgések leírása belső koordináták segítségével

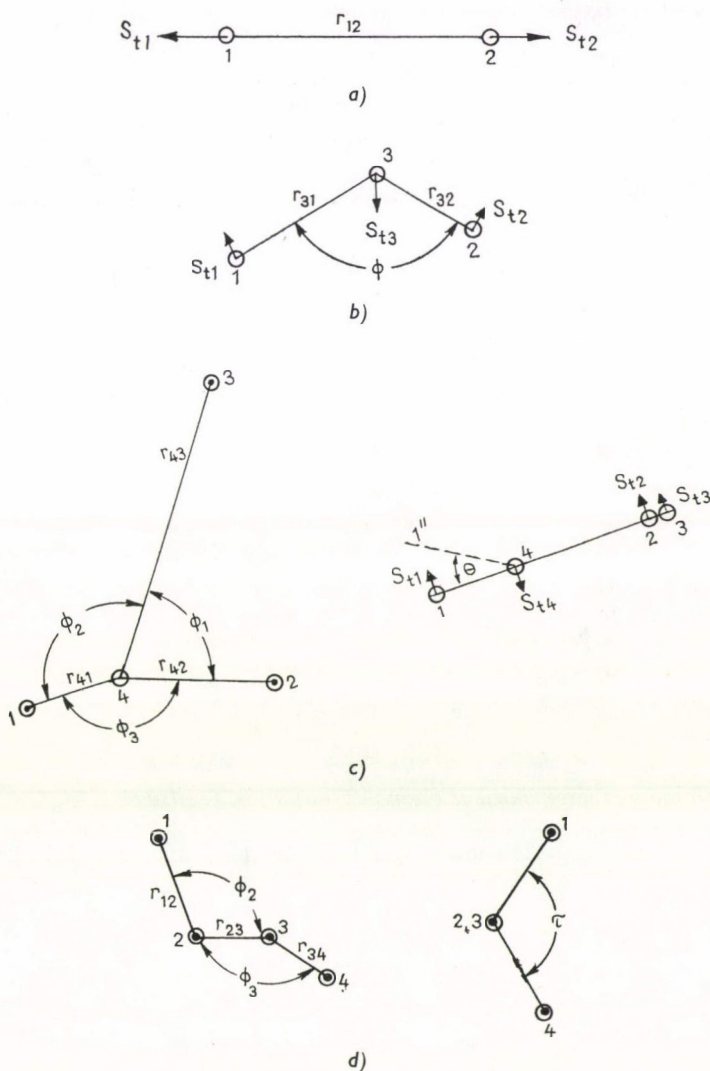
A szabad molekulák olyan speciális rezgő rendszert alkotnak, amelyben a részecskék egymással kölcsönhatásban állnak, de külső erőter nincs jelen, ezért nem minden mozgási szabadsági fok rezgő jellegű. A molekula — atomjainak egyensúlyi helyzete körül végzett rezgőmozgásán kívül — önmaga mint egész is végezhet haladó és forgó mozgást. A rezgő jellegűek a molekula belső szabadsági fokai, utóbbiak a molekula külső szabadsági fokai. A haladó mozgásra 3, a forgó mozgásra szintén 3 szabadsági fok jut (kivéve a lineáris molekulákat, ahol 2), ezáltal egy n atomos molekula belső szabadsági fokainak és így normálrezgéseinek száma $3n-6$ (ha a molekula lineáris: $3n-5$). Amennyiben a molekula planáris szerkezetű, $2n-3$ síkrezgése és $n-3$ síkra merőleges rezgése van.

Amiatt, hogy a molekulák mozgási szabadsági fokai nem mind rezgő jellegűek, nem célszerű derékszögű koordinátákat (Descartes-koordinátákat) használni. Ekkor ugyanis a több szabadsági fokú rezgő rendszer mozgását leíró (lásd [2])

$$(M^{-1}F - \omega^2 I)A = 0 \quad (1)$$

mátrixegyenletnek — ahol az M diagonális mátrix a részecskék tömegét, az F pozitív definit hermitikus mátrix az F_{ij} erőállandókat, az A vektor a komplex rezgési amplitúdókat tartalmazza, I az egységmátrixot és ω a (kör) frekvenciát jelöli — zérus gyökei is lennének. A rezgőmozgást közvetlenül jellemző koordináták pl. az ún. belső koordináták vagy vegyérték-koordináták [4–6], amelyek vagy azt fejezik ki, hogy valamely kötés távolsága az egyensúlyi helyzethez képest mennyit változik, vagy azt, hogy a molekula kötésszögei, illetve a kötések által meghatározott síkok közötti szögek

milyen mértékben deformálódnak a rezgés során az egyensúlyhoz képest. A nyújtási, hajlítási, valamint torziós és síkra merőleges deformációk (out-of-plane) belső koordináta-típusokat a 2. ábra mutatja. E belső koordináták, illetve kombinációik (lásd az I.5.1. fejezetet, illetve a 3., 10. és 13. táblázatokat) a teljes rendszer helyzetét leíró általános koordinátákat szolgáltathatnak.



2. ábra. Belső koordináta-típusok. (Az S vektorok a deformációkat mutatják) [6]

A $\{q_i\}$ belső koordináták az $\{r_i\}$ Descartes-koordinátákból lineár-transzformációval származtathatók:

$$|q\rangle = B|r\rangle, \quad (2)$$

ahol B a transzformációs mátrixot jelöli, a $|\dots\rangle$ jel pedig az oszlopvektort mutatja. (A sorvektorokat $\langle\dots|$ -el jelöljük.)

Megmutatható [6], hogy a molekulák mozgásegyenlete (1) alapján a

$$\boxed{(G_q F_q - \omega^2 I) L = 0} \quad (3)$$

alakra hozható*, ahol

$$G_q = B M^{-1} B^T \quad (4)$$

F_q pedig a belső koordináták alapján számított erőállandókat tartalmazza. Harmonikus közelítésben a mátrixot az

$$F_{ij} = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 \quad (5)$$

kvadratikus erőállandók alkotják. Az L vektor a rezgés alakját leíró normált elmozdulásvektor.

A molekulák rezgőmozgása (3) segítségével tárgyalható. A legegyszerűbb, két-atomos molekulák esetén a (3) mátrixegyenlet a lineáris oszcillátorok

$$\left(\frac{F}{\tilde{m}} - \omega^2 \right) l = 0 \quad (6)$$

egyenletére egyszerűsödik [3, 6], ahol F az erőállandót**, \tilde{m} a redukált tömeget $\{\tilde{m} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)\}$, l a rezgési amplitúdót jelöli. Bonyolultabb molekulák esetén a (3) egyenlet megoldásához az egyenlet

$$|G_q F_q - \omega^2 I| = 0 \quad (7)$$

karakterisztikus determinánsát kell kifejtteni és megoldani.

1.1.2. A molekularezgések leírása normálkoordináták segítségével

Megmutatható, hogy léteznek olyan koordináták, amelyeknek bázisán a molekularezgések lineáris oszcillátorok rezgéseinek összegeként tárgyalhatók. Ezeket a koordinátákat a molekulák normálkoordinátáinak, s az e koordináták mentén végzett rezgéseket a molekula normálrezgéseinek nevezik. A molekulák $\{Q_i\}$ normálkoordinátái a $\{q_i\}$ belső koordinátákból lineár-transzformációval származtathatók:

$$|Q\rangle = L^{-1}|q\rangle, \quad (8)$$

* A dolgozat I.1. fejezetében a (3) egyenletet különböző bázisokon is felírjuk, amelyeken G és F elemei különböznek. Ezért itt a bázist is feltüntetjük, a mátrixok alsó indexeként. A későbbiekben, ahol megkülönböztetésre nincs szükség, G_q és F_q helyett G -t és F -et használunk.

** Az egydimenziós oszcillátor erőállandóját általában k -val szokás jelölni, itt ettől eltérünk, s a spektroszkópiában erőállandók jelölésére használatos F -et használjuk, hogy a dolgozat különböző helyein előforduló erőállandó-jelölések ne térjenek el.

ahol az L mátrix oszlopait azon L_α vektorok adják, amelyek az egyes ω_α^2 sajátértékek (3)-ba történő behelyettesítése során adódnak.

Míthogy a normálkoordináták bázisán G egység mátrix [6], a (3) mozgásegyenlet ezen a bázison

$$(L^T G_q F_q L - \omega^2 I) L = 0 \rightarrow (L^T F_q L - \omega^2 I) L = 0 \quad (9)$$

alakú lesz. Az $L^T F_q L = F_Q$ mátrix diagonális, így a (9) egyenlet $3n-6$ független mozgásegyenletből áll:

$$\sum_{i=1}^{3n-6} (F_{ii} - \omega^2) l_i = 0. \quad (10)$$

Az egyes egyenletek a lineáris oszcillátor (6) mozgásegyenletével egyeznek meg.* Megjegyzendő, hogy F_Q az mátrix csak akkor diagonális — azaz a (10) felbontás csak akkor végezhető el —, ha valamennyi ω_α^2 sajátérték különböző. Az egyező sajátértékeket degenerált vagy elfajult frekvenciáknak nevezik.

A normálkoordinátákat csak akkor tudjuk meghatározni, ha ismert az L mátrix, azaz, ha a (3) egyenlet sajátértékeit és sajátvektorait kiszámítottuk.

A (3) egyenlet (7) karakterisztikus determinánsának dimenziója a molekula szabadsági fokaitól függ, s így a molekulát alkotó atomok számának növekedésével együtt nő. A számítás dimenziója a molekula szimmetriájának figyelembevételével csökkenthető.

1.1.3. A molekularezgések leírása szimmetriakoordináták segítségével

Egy szimmetriatulajdonságokkal rendelkező molekula összes szimmetriaoperációja pontcsoportot alkot. A csoportelmélettel és kémiai alkalmazásával kapcsolatban az irodalomra utalunk [7—11], a következőkben csak néhány alapfogalmat említünk meg.

A csoport szimmetriaoperációi a normálkoordináták terében olyan mátrixokkal reprezentálhatók, amelyek csak elfajult ω_α^2 frekvenciasajátértékek esetében nem diagonálisak: ezek irreducibilis reprezentációt alkotnak, szemben a szimmetriaoperációk sok egyéb (pl. Descartes-koordináták terében vett) reprezentációjával, amelyek reducibilisek. A reducibilis reprezentációk irreducibilis reprezentációk direkt összegére bonthatók. Az irreducibilis reprezentációk szimmetriaosztályokra vonatkozó karaktereit (a mátrixok spurjait) karaktertáblázatokban adják meg [6—11].

Az egyes normálkoordináták az egyes irreducibilis reprezentációknak megfelelően transzformálódnak. Degenerált sajátérték esetén a normálkoordináták tetszőleges lineáris kombinációja transzformálódik hasonlóképpen.

Belátható, hogy nemcsak a normálkoordináták terében alkotnak a szimmetriaoperációk mátrixreprezentációi irreducibilis reprezentációt. A belső koordinátákból uniter transzformációval képzett S vektor,

$$|S\rangle = U|q\rangle, \quad (11)$$

* A lineáris oszcillátor normálkoordinátája $Q = \sqrt{m} \cdot r$, ekkor a (6) mozgásegyenlet $(F - \omega^2)I = 0$ alakú.

amelyet szimmetriakoordinátáknak nevezett $\{S_i\}$ elemek alkotnak, ugyanezzel a tulajdonsággal rendelkezik, azaz irreducibilis reprezentációk bázisvektora lehet. Az U mátrix és a szimmetriakoordináták a projekciós operátor [11] segítségével meghatározhatók.

A koordinátatranszformáció hatására a mozgásegyenlet

$$(L_S^T G_S F_S L_S - \omega^2 I) L_S = 0 \quad (12)$$

alakú lesz, ahol

$$G_S = U G_q U \quad (13)$$

és

$$F_S = U F_q U \quad (14)$$

L_S pedig a normál- és szimmetriakoordináták közötti transzformációs mátrix

$$|Q\rangle = L_S^{-1} |S\rangle, \quad (15)$$

azaz a normálkoordináták a szimmetriakoordináták lineáris kombinációi.

Mivel a szimmetriakoordináták irreducibilis reprezentációk bázisai lehetnek, ezért a szimmetriakoordináták bázisán a reducibilis reprezentációk irreducibilis reprezentációk direktösszegeként írhatók fel. Ez azt jelenti, hogy a G_S és F_S mátrix kvázi-diagonális alakú, s a (3) sajátérték-feladat kisebb dimenziójú blokkokra bontva is elvégezhető.

I.2. Molekulák rezgőmozgásának kvantummechanikai leírása

A molekulák rezgőmozgása során diszkrét energiaszintek közötti átmenetek valósulnak meg, a rezgőmozgás energiája kvantált. A rezgőmozgást a kvantummechanikában az alábbiakban írjuk le. Látni fogjuk azonban, hogy az alapvetően más megközelítési mód mellett is érvényesek a molekularezgésekre a klasszikus mechanikában levezetett (3), (9), (12) képletek, természetesen a mátrixelemek jelentése a kvantummechanikának megfelelően módosul.

Egy rendszer kvantummechanikai leírása során a

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (16)$$

Schrödinger-egyenletet kell megoldani, ahol \hat{H} a rendszer Hamilton-operátora, E a rendszer energiája, Ψ a rendszer állapotfüggvénye. A legegyszerűbb rezgő rendszer, az egy szabadsági fokú harmonikus oszcillátor.

I.2.1. A harmonikus oszcillátor

Ha az m tömegpont a

$$V = \frac{1}{2} Fr^2 \quad (17)$$

harmonikus potenciáltérben mozog (F az erőállandó*, r a koordinátát jelöli), a Ha-

* Lásd az erőállandók jelölésére a (6) képlet alapján tett korábbi megjegyzést.

milton-operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} Fr^2 \quad (18)$$

ezt (16)-ba helyettesítve, a differenciálegyenlet megoldásaként az

$$E_v = \hbar\omega_0 \left(v + \frac{1}{2} \right) \quad v = 0, 1, 2, \dots, n \quad (19)$$

v -től függő rezgési energiaszintek és a

$$\Psi_v(r) = \left[\hbar^{1/2} \frac{m\omega}{\pi^{1/2}} 2^v v! \right]^{1/2} H_v \left[\left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} r \right] \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2 \right) \quad (20)$$

állapotfüggvények adódnak. (20)-ban H_v egy v -ed fokú, ún. Hermite-polinomot jelöl [11].

A harmonikus oszcillátor szomszédos energianívói állandó $\hbar\omega_0$ energiával különböznek egymástól, amely energia a zéruspont-energia kétszerese.

1.2.2. Molekulák normálrezgései

Idealizált esetben az \tilde{m} tömegközéppontú ($\tilde{m} = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$) harmonikus rezgőmozgást végző kétatomos molekulát a harmonikus oszcillátor modellezi.

Általános esetben, többatomos molekulákra a (8) normálkoordináták és a (9) egyenlet segítségével felírt potenciális energia

$$2V = (q|F|q) = (Q|L^T FL|Q) = (Q|\omega^2 I|Q) = \sum_{k=1}^{3n-6} \omega_k^2 Q_k^2 \quad (21)$$

s a (16) Schrödinger-egyenlet kifejtett alakja

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^{3n-6} \frac{\partial^2 \psi_v}{\partial Q_k^2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3n-6} \omega_k^2 Q_k^2 \psi_v = E_v \psi_v \quad (22)$$

lesz, amely $3n-6$ egyenletté szeparálható. A rezgés állapotfüggvénye

$$\psi_v = \psi(Q_1) \psi(Q_2) \dots \psi(Q_{3n-6}) \quad (23)$$

energiája

$$E_v = E(1) + \dots + E(3n-6) \quad (24)$$

Belátható, hogy a (22) egyenlet $3n-6$ egyenlete valamennyi k -ra egy harmonikus oszcillátor (16) egyenletével egyezik meg.* F és G ismeretében a normálrezgések frekvenciái (3)-al kiszámíthatók, s (8) alapján a normálrezgésekhez tartozó elmozdulásvektorok is meghatározhatók. G kézikönyvekben [6] megadott képletek alapján a molekulageometria ismeretében kiszámítható, F azonban a gyakorlatban nem ismert, s vagy kísérletekből, vagy számítással külön meg kell határozni. Előbbi esetben a kísérleti frekvenciákból számítják az erőállandókat (normálkoordináta-analízis), de ekkor az ismeretlen erőállandók száma általában meghaladja az ismert frekvencia-értékek számát. A számítás ennél egzaktabb, a dolgotatban is ezt használjuk: az elvet az alábbiakban ismertetjük.

* Ehhez (18)-ba a $Q = \sqrt{m} \cdot r$ normálkoordinátát kell helyettesíteni.

I.2.3. A molekularezgések számításához szükséges erőter (F) direkt, kvantummechanikai meghatározásának elve

I.2.3.1. Molekulák energiája. A Born—Oppenheimer-féle közelítés

Egy N db, $-e$ töltésű, m_e tömegű, \mathbf{r}_i koordinátájú elektronból és n db $Z_a e$ töltésű, m_a tömegű, \mathbf{r}_a koordinátájú atommagból álló molekula Hamilton-operátora, ha külső erők nem hatnak,

$$\hat{H} = \hat{T}_n + (\hat{T}_e + \hat{V}_B) = \hat{T}_n + \hat{H}_e \quad (25)$$

alakba írható, ahol nem-relativisztikus közelítésben

$$\hat{T}_n = -\frac{\hbar}{2} \sum_{a=1}^n m_a^{-1} \Delta_a \quad (26)$$

a magok kinetikus energiájának operátora,

$$\hat{T}_e = -\frac{\hbar}{2m_e} \sum_{i=1}^N \Delta_i \quad (27)$$

az elektronok kinetikus energiájának operátora, míg

$$\hat{V}_B = e^2 \sum_{1=i < j}^N r_{ij}^{-1} - e^2 \sum_{a=1}^n \sum_{i=1}^N Z_a r_{ia}^{-1} + e^2 \sum_{1=a < b}^n Z_a Z_b r_{ab}^{-1} \quad (28)$$

a kölcsönhatási energia operátora, ahol r_{ij} az $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ részecsketávolságot jelenti, a Laplace-operátorok (Δ) i és a indexe pedig azt mutatja, hogy az i . elektron és az a . mag koordinátáira vonatkoznak a differenciálások.

Mivel egy proton tömege mintegy 1800-szorosa az elektron tömegének, a magok sebessége jóval kisebb az elektronokénál. Born és Oppenheimer [12] kimutatták, hogy az elektronok energiája mintegy két nagyságrenddel nagyobb a magok rezgési energiájánál. Ezáltal, a magok egyensúly közelében végzett kis amplitúdójú rezgései esetén, a magok és az elektronok mozgása szétválasztható [11, 12], s a molekula (16) Schrödinger-egyenlete:

$$\{\hat{H}_e + \hat{T}_n\} \Psi(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) = E \Psi(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) \quad (29)$$

két egyenletre (lásd (31) és (32)) bontható. A molekula $\Psi(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i)$ hullámfüggvényei felbonthatók egyrészt csak a magok mozgását leíró $\chi_{x\mu}(\mathbf{r}_a)$ függvényre, illetve az elektronállapotokat leíró $\psi_x(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i)$ függvényre:

$$\Psi(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) = \psi_x(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) \chi_{x\mu}(\mathbf{r}_a) \quad (30)$$

A $\psi_x(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i)$ elektronfüggvények (28) alapján nemcsak az elektronkoordinátáktól, hanem a magkoordinátáktól is függenek, x a gerjesztettségi állapotot mutatja.

Az elektronállapotok (ψ_x) számításánál a magokat fentiek alapján nyugalomban levőknek tekintik (azaz \hat{T}_n -et nem veszik figyelembe), emellett feltételezik, hogy a magok helyzetének változását az elektronállapotoké folytonosan követi (Born—Oppenheimer-közelítés). Így az elektronállapotok a

$$\hat{H}_e \psi_x(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) = E_x(\mathbf{r}_a) \psi_x(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_i) \quad (31)$$

egyenletből határozhatók meg, a magok mozgását pedig a

$$\{\hat{T}_n + E_x(\mathbf{r}_a)\} \chi_{x\mu}(\mathbf{r}_a) = E_{x\mu} \chi_{x\mu}(\mathbf{r}_a) \quad (32)$$

egyenlet írja le. A Born—Oppenheimer-közelítés alapján általában \hat{H}_e -t tekintik a molekulák Hamilton-operátorának.

A (32) egyenletből kitűnik, hogy a magok mozgásának potenciális energiáját az elektronokra vonatkozó (31) egyenlet energiái határozzák meg ($V_n = E_x(\mathbf{r}_a)$).

Ez a megállapítás a rezgési színek kvantummechanikai számításának alapja. A színeképszámítás (3) sajátértékfeladatának F mátrixa ugyanis a magok rezgésének potenciális energiáiból deriválható, s így harmonikus közelítésben a mátrix elemeit az

$$F_{ij} = \left(\frac{\partial^2 E_x(\mathbf{r}_a)}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 \quad (33)$$

egyenlőség határozza meg.

Az erőállandók számítása során tehát előbb az $E_x(\mathbf{r}_a)$ energiát, majd annak belső koordináták szerinti második deriváltját kell meghatározni. Az energia többféle kvantumkémiai módszerrel határozható meg (*ab initio*, MINDO, CNDO stb.), a dolgozatban a CNDO-közelítést (I.2.3.2.1. fejezet) alkalmaztuk.

Az erőállandók számításához az erőmódszert (I.2.3.3. fejezet) használtuk fel.

I.2.3.2. Az energia számítása függetlenrészecske-moddal

Az energia várható értékét az

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \quad (34)$$

egyenlet adja, ahol \hat{H} a (31) egyenletben \hat{H}_e -vel jelölt, elektronokra vonatkozó Hamilton-operátor, Ψ pedig a függetlenrészecske-modellben [13, 14] determináns alakú elektron-hullámfüggvény [14, 15]

$$\Psi = \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \dots & \psi_1(n) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_n(1) & \dots & \psi_n(n) \end{vmatrix}, \quad (35)$$

ahol ψ_i a molekulapályák térkoordinátáktól függő részét jelöli.

ψ_i a Φ_μ atompályák lineáris* kombinációjával kapható (LCAO-módszer):

$$\psi_i = \sum_\mu c_{\mu i} \Phi_\mu \quad (36)$$

$c_{\mu i}$ értékeinek a (34), (35), (36) egyenletekből történő meghatározására *Roothaan* [16] vezette le a (37) összefüggést.

$$\sum_\nu (F_{\mu\nu} - E_i S_{\mu\nu}) c_{\nu i} = 0 \quad \langle = \rangle \hat{F} \psi_i = E_i \psi_i, \quad (37)$$

ahol ψ_i a $c_{\mu i}$ -től függő molekulapálya térbeli része

E_i a pályaenergia

$S_{\mu\nu}$ az átfedési integrál ($S_{\mu\nu} = \int \Phi_\mu(1) \Phi_\nu(1) dV_1$)

* A görög indexek az atompályákra, a latin betűsöket a molekulapályákra vonatkoznak.

$F_{\mu\nu}$ pedig:

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda\sigma} P_{\lambda\sigma} \left[(\mu\nu|\lambda\sigma) - \frac{1}{2} (\mu\lambda|\nu\sigma) \right], \quad (38)$$

ahol $H_{\mu\nu}$ a rezonancia-integrál,
 $P_{\lambda\sigma}$ a töltéssűrűség-mátrix eleme; P diagonális elemei adják az atompályák elektronsűrűségét,
 $(\mu\nu|\lambda\sigma)$ pedig a kételektron-integrálokat jelöli:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma) = \int \int \Phi_\mu(1) \Phi_\nu(1) \frac{1}{r_{12}} \Phi_\lambda(2) \Phi_\sigma(2) dV_1 dV_2. \quad (39)$$

A (37) egyenletek (Hartree—Fock—Roothaan (HFR)-egyenletek) nemcsak explicit, hanem implicit módon is függenek $c_{\mu i}$ -től ($F_{\mu\nu} = f_1(P_{\mu\nu}) = f_2(c_{\mu\nu})$). Ezért iteratív úton lehet a megoldáshoz eljutni: alkalmasan megválasztott $c_{\mu i}$ kezdőértékek segítségével előbb $F_{\mu\nu}$ -t kell meghatározni, majd a (37) egyenletrendszert megoldani. Az iteráció végén az $F_{\mu\nu}$ [lásd (38)] értékek nem változnak már két egymást követő iterációs lépésben: önmagukkal konzisztensek. A módszert az irodalom önmagával konzisztens tér (self consistent field) módszernek, röviden SCF-módszernek nevezi.

A fentiekben ismertetett általános módszert a gyakorlatban többé-kevésbé egyszerűsítve használják. A számításokhoz véges számú bázisfüggvényt használnak fel, s nem pedig a végtelen dimenziós teljes ortonormált rendszert. Ezek a számítások igen pontosak, azonban rendkívül költségesek, s a gyakorlatban elterjedtek az egyéb elhanyagolások is bevezető, s különböző kísérleti adatokat is felhasználó félempirikus kvantumkémiai módszerek, mint amilyen a dolgozatban felhasznált CNDO/2-módszer.

I.2.3.2.1. A CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap) -közelítésben alkalmazott egyszerűsítések

- Csak a vegyértékelektronok pályáit veszik explicit módon figyelembe. A többi elektron csak az atomtörzsben jelenik meg: az atomtörzs gömbszimmetrikus potenciálját a magok és a „törzselektronok” szabják meg.
- A két elektron kölcsönhatását leíró Coulomb-integrálokban a különböző atomi pályák átfedését elhanyagolják:

$$(\mu\nu|\lambda\sigma) = \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\sigma} (\mu\mu|\lambda\lambda) \quad (40)$$

Az atompályák szögfüggő részeit elhagyják, így az integrál értéke független lesz attól, hogy A és B milyen atompályáján vannak az elektronok:

$$(\mu\mu|\lambda\lambda) = \gamma_{AB} \quad \mu \in A, \quad \lambda \in B \quad (41)$$

- Egy A atomon centrált elektron kölcsönhatását B atomtörzsével (U_B) függetlennek tekintik a pálya típusától

$$(\mu|U_B|\nu) = \delta_{\mu\nu} V_{AB}, \quad \mu, \nu \in A \quad (42)$$

d) A rezonanciaintegrálokat az átfedési integrálokkal arányosnak tekintik:

$$H_{\mu\nu} = \beta_{AB}^0 S_{\mu\lambda}, \mu \in A, \nu \in B, \quad (43)$$

ahol β_{AB}^0 kötési paraméter.

e) Az egyik atomon centrált pályán levő elektron kölcsönhatása saját atomtörzsével

$$U_{\mu\mu} = \left(\mu \left| -\frac{1}{2} \Delta - \hat{V}_A \right| \mu \right) \quad \mu \in A \quad (44)$$

spektrumadatokról számítható ki.

A CNDO/2 módszerben [17, 18] $U_{\mu\mu}$ -t a Mulliken-féle elektronegativitás [19] segítségével határozzák meg:

$$U_{\mu\mu} = -\frac{1}{2} (I_\mu + A_\mu) - \left(Z_A - \frac{1}{2} \right) \gamma_{AA}. \quad (45)$$

Bevezetve a P_{AA} teljes elektronsűrűséget (az A atomon):

$$P_{AA} = \sum_{\mu} P_{\mu\mu} \quad \mu \in A \quad (46)$$

a (37) egyenlet

$$\boxed{FC = CE} \quad (47)$$

alakú sajátértékegyenletre egyszerűsödik, ahol

$$F_{\mu\mu} = U_{\mu\mu} + \left(P_{AA} - \frac{1}{2} P_{\mu\mu} \right) \gamma_{AA} + \sum_{A \neq B} (P_{BB} \gamma_{AB} - V_{AB}) \quad (48)$$

$$F_{\mu\nu} = \beta_{AB}^0 S_{\mu\nu} - \frac{1}{2} P_{\mu\nu} \gamma_{AB}; \quad \mu \neq \nu. \quad (49)$$

A CNDO/2 módszer elég jó közelítést ad a molekulák geometriájára, egyes erőállandókra és elektroneloszlására [11]. A módszer hibája gyakran szisztematikus és ezért megbecsülhető. Alkalmos korrekciós eljárással (I.5.2. fejezet) vagy a félempirikus paraméterek megfelelő megválasztásával a kívánt fizikai mennyiségekre jó értéket ad.

I.2.3.3. Az erőmódszer

Az F_{ij} erőállandók meghatározásához a (31) egyenlet alapján megkapható molekulaenergia — ez a CNDO/2-közelítésben a (47) egyenlet megoldását jelenti — (33)-nak megfelelő második deriváltjait kell kiszámítani. A kétszeri analitikus deriválás gyakran kivihetetlen és igen gépidőigényes, a kétszeri numerikus pontatlan. Az erőállandók számítására Pulay P. dolgozott ki időtakarékos algoritmust [20—23]: az ún. erőmódszert.

Az erőmódszerben az első deriválás — amely a $\{q_i\}$ koordináták menti erőket adja — analitikus:

$$f_i = -\frac{\partial E}{\partial q_i}, \quad (50)$$

míg a második deriválás numerikus.

A sűrűségmátrixon, P -n (illetve a számítások $c_{\mu i}$ paraméterein) keresztül a hullámfüggvény is változik a koordinátákkal, ezért az energia nemcsak a magkoordináták, hanem a sűrűségmátrix függvénye $E = E(\mathbf{q}, P(\mathbf{q}))$, s ezért

$$\frac{dE}{dq_i} = \frac{\partial E}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial E}{\partial P_{ij}} \frac{\partial P_{ij}}{\partial q_i}. \quad (51)$$

Mínthogy azonban az energiának minimuma van az iteráció végén kapott $c_{\mu i}$ paraméternél:

$$\frac{\partial E}{\partial P_{ij}} = 0. \quad (52)$$

A CNDO-energia felírható, mint az egy és két atom hozzájárulásával adódó tagok összege [24]

$$E = \sum_A E_A + \sum_{A < B} E_{AB}, \quad (53)$$

ahol $E_A = E_A(q)$ és

$$E_{AB} = \sum_{\mu} \sum_{\nu} \left(2P_{\mu\nu} \beta_{\mu\nu} - \frac{1}{2} P_{\mu\nu}^2 \gamma_{AB} \right) + (P_{AA} P_{BB} - P_{AA} Z_B - P_{BB} Z_A) \gamma_{AA} + \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}. \quad (54)$$

Az A atomra ható x -irányú erő ekkor:

$$-f_{x_A} = \frac{\partial E}{\partial x_A} = - \sum_{A < B} \frac{\partial E_{AB}}{\partial x_A}. \quad (55)$$

A Descartes-koordinátarendszerről a belső koordináták bázisára történő (2) koordinátatranszformáció felhasználásával az $\{f_i\}$ erők $\{\varphi_i\}$ belső erőkké transzformálhatók:

$$|\varphi\rangle = [BB^T]^{-1} B |f\rangle. \quad (56)$$

Ha a q_l belső koordináta Δq_l megváltozásakor a φ_k erőkomponens változása $\Delta \varphi_k$, akkor az F_{kl} erőállandó:

$$F_{kl} = - \frac{\Delta \varphi_k}{\Delta q_l}. \quad (57)$$

Az (57) egyenlőség fennállásához Δq_l értéke nem lehet tetszőleges: ha túl kicsi, úgy F_{kl} értékének bizonytalansága nagy, ha túl nagy, pontatlan a numerikus deriválás.

A számítások során felhasznált Δq_l értékeket az I.5. fejezetben ismertetjük.

I.3. Molekulák kölcsönhatása az elektromágneses sugárzással. Infravörös- és Raman-színképek

Az eddigiekben az egyes rezgési állapotokról, s a hozzájuk tartozó állapotfüggvényekről, energiaszintekről (frekvenciákról) szóltunk, de még nem említettük a szintek közötti átmeneteket, valamint a rezgési energiaszintek összességét: a rezgési színképet.

A molekulák rezgési energiájának nagyságrendje különbözik az elektronátmenetek, illetve a forgási energia nagyságától (lásd az I.2.3.1. fejezetet, illetve [4]-et és [12]-t), s a rezgési energia nagyságrendjébe eső energia közlésével a molekulákban a rezgésállapot megváltozása indukálható. Ekkora energiájú például az elektronmágneses sugárzás (EMS) $10\,000\text{--}10\text{ cm}^{-1}$ -es hullámszámú tartománya is.

I.3.1. Az EMS abszorpciója*

Ha a molekula a fenti hullámszámtartományú EMS-t abszorbeálja, akkor az abszorpció során az E_v rezgési energiájú, ψ_v rezgésállapotból $w_{v'v}$ valószínűséggel az $E_{v'}$ energiájú $\psi_{v'}$ rezgésállapotba kerül.

Az átmeneti valószínűség $(\psi_{v'}|\mu|\psi_v)^2$ -el arányos, ahol μ a molekula dipólusmomentuma. E mátrixelem nagysága határozza meg az átmenet intenzitását, ha ez zérus, az átmenet tiltott.

Míg az átmenet intenzitásának meghatározásához a mátrixelemet is ki kell számítani, addig az átmenet lehetősége konkrét számítás nélkül, szimmetriamegfontolások alapján is eldönthető. A mátrixelem ugyanis zérustól különbözik, ha valamelyik komponense $((\psi_{v'}|\mu_X|\psi_v), (\psi_{v'}|\mu_Y|\psi_v)$ vagy $(\psi_{v'}|\mu_Z|\psi_v))$ bármely megengedhető szimmetriaműveletre változatlan marad, azaz teljesen szimmetrikus. ψ_v és $\psi_{v'}$ csak a rezgésállapotot jellemző v paraméterben különbözik, azt kell csak megvizsgálni, hogy ugyanúgy transzformálódik-e a szimmetriaművelet hatására μ_X, μ_Y vagy μ_Z , illetve — minthogy a dipólusmomentum komponensei a konstans töltés és az X, Y, Z koordináták szorzatával értelmezettek — az X, Y vagy Z koordináta, mint $\psi_v, \psi_{v'}$.

A ψ függvények a \hat{H} operátor sajátfüggvényei, s ezért egyben bázisfüggvényei a \hat{H} operátor szimmetriacsoportja (G_H) irreducibilis reprezentációinak. Ha tehát X, Y vagy Z egyike is G_H valamelyik irreducibilis reprezentációjának bázisa, más szóval X vagy Y vagy Z a molekula pontcsoportja szimmetriaspecieszeinek valamelyikéhez tartozik, úgy a mátrixelem teljesen szimmetrikus, az átmenet megengedett. Azt, hogy X, Y vagy Z melyik szimmetriaspecieszbe tartozik, karaktertáblák mutatják [5, 6, 11].

A $\{Q_i\}$ normálkoordináták is G_H irreducibilis reprezentációi bázisát alkotják. Láttuk, hogy μ_X, μ_Y vagy μ_Z (illetve X, Y vagy Z) szintén bázisát alkothatja néhány irreducibilis reprezentációnak.

Az infravörös sugárzás hatására a molekulának azon normálrezgései gerjesztődnek fentiek alapján — azaz lesznek aktívak és jelennek meg az infravörös színekben —, amelyek ugyanúgy transzformálódnak, mint a dipólusmomentum valamelyik vektorkomponense: az aktív normálrezgések ugyanabba a szimmetriaspecieszbe tartoznak, mint μ_X, μ_Y vagy μ_Z (illetve X, Y vagy Z). A normálrezgések szimmetriája a molekula pontcsoportjának ismeretében meghatározható, azt, hogy μ_X, μ_Y , illetve μ_Z melyik szimmetriaspecieszbe tartozik, a karaktertáblák tüntetik fel, így a normálrezgések infravörös aktivitása a karaktertáblák alapján eldönthető.

* Az EMS kölcsönhatása — abszorpciója, szóródása — a molekulával, mint időtől függő perturbáció tárgyalható. A részletek Török és Kapuy [11] munkájában találhatók.

I.3.2. Az EMS diszperziója

Amennyiben a molekulákkal való kölcsönhatás során az EMS rugalmatlanul szóródik, a beeső frekvencia különbözik a szórt frekvenciától (Raman-effektus).

Megfelelő perturbáló sugárzással elérhető, hogy a különbség a rezgési frekvenciákra legyen jellemző, s a szóródás során a rezgési energiaszintek is gerjesztődjenek, így a molekularezgések Raman-színképe regisztrálható.

A szóródás során az EMS elektromos térerőssége a molekulában dipólusmomentumot indukál: $|\mu\rangle = \alpha|E\rangle$, ahol α a polarizálhatósági tenzor, $|E\rangle$ az elektromos térerősség oszlopvektora.

A szóródás során a $v \rightarrow v'$ rezgésátmenetek átmeneti valószínűsége ez esetben a molekula α polarizálhatósági tenzorával arányos: $w_{vv'} = f((\psi_{v'}|\alpha|\psi_v)^2)$, így az átmenet feltétele, hogy a $(\psi_{v'}|\alpha_{XX}|\psi_v)$, $(\psi_{v'}|\alpha_{XY}|\psi_v)$... mátrixelemek valamelyike teljesen szimmetrikus legyen. Ez akkor következik be, ha az α_{XX} , α_{XY} ... tenzorelemek (vagy a szimmetria szempontjából velük azonosan viselkedő XX , XY ... szorzatok) egyike a szimmetriaműveletek hatására ugyanúgy transzformálódik, mint $\psi_{v'}$, ψ_v . Ekkor ez a tenzorelem bázisát alkotja G_H egyik irreducibilis reprezentációjának, s a molekula pontcsoportja egyik szimmetriaspecieszébe tartozik. Azt, hogy az α_{XX} , α_{XY} ... elemek melyik szimmetriaspecieszébe tartoznak, a karaktertáblák [5, 6, 11] tüntetik fel.

Az I.3.1. fejezet, illetve a fent elmondottak alapján a molekularezgések Raman-színképében egy normálfrekvencia megjelenésének — aktivitásának — feltétele az, hogy az ehhez a normálfrekvenciához rendelt normálkoordináta azon irreducibilis reprezentációhoz tartozzék, amelynek az α_{XX} , α_{XY} ... polarizálhatósági tenzorelemek valamelyike (illetve lineáris kombinációjuk) képezi a bázisát. A Raman-aktív normálrezgések tehát azokba a szimmetriaspecieszébe tartoznak, mint az α_{XX} , α_{XY} ... tenzorelemek (illetve lineáris kombinációjuk). Így a karaktertáblák alapján a normálrezgések Raman-aktivitása is eldönthető.

I.4. Egyensúlyi geometriaszámítás a CNDO/2 módszerrel

Molekulák egyensúlyi geometriája az az atomkonfiguráció, amelyben nem hatnak olyan erők, amelyek ezt az állapotot megszüntetnék. Az atomokra ható erők — az energiagradiens — zérusok, az energiafelületnek itt tehát szélső értéke van. A szélső érték minimum, minthogy a második deriváltak — az erőállandók — mátrixa pozitív definit (vö. I.1.2. fejezet).

Az egyensúlyi geometria számítására alkalmazott három fő módszer a következő:

- a direkt módszer
- a „léptetési” módszer
- az erőrelaxációs módszer.

1.4.1. A direkt módszer

Kellően nagyszámú magelrendeződéshez kiszámítva az energiát, az energiaminimum extrapolációval meghatározható. A módszer igen hosszadalmas, mert az energiafelület sok pontjához tartozó energiaértékeket kell kiszámítani (azaz végigszámítani az SCF iterációs ciklust) — ugyanakkor az extrapolációval kapott eredmény nem kielégítően pontos.

1.4.2. A „léptetési” módszer

1.4.2.1. A módszer ismertetése

Csökken a kiszámítandó pontok száma, ha a számítás során az atomokat szisztematikusan, a ható erők irányában, azok abszolút értékével arányosan mozdítjuk el. Az erőket az (53) egyenlet analitikus deriválásával határozzuk meg (vö. I.2.3.3. fejezettel).

Az új konfigurációhoz tartozó energia a minimumhoz közelebb esik. A számítás pontossága előre megadott tűréshatárral tetszőlegesen növelhető. Az általában használt konvergenciakritérium az energia adott értéknél kisebb változása.

E dolgozatban a szélsőértékfeladat megoldására a Fletcher—Powell-eljárást [25] használtuk.

A módszer említett előnyei mellett azonban még itt is szükség van a hullámfüggvény minden lépésben történő külön meghatározására.

1.4.2.2. A Nalewajski-féle változat

Ezt küszöböli ki a Nalewajski-féle „force field method” (erőtér-módszer) [26, 27]. Ez a módszer ugyanis drasztikusan csökkenti a kiszámítandó SCF hullámfüggvények számát azáltal, hogy egy-egy elektroneloszlás erőterében külön geometria-optimalizációt végez. Az optimalizáció eredményeként kapott magelrendeződéshez tartozó pszeudo-minimum ugyan Eckart tétele értelmében nyilvánvalóan felette lesz az ehhez a konfigurációhoz tartozó SCF hullámfüggvénnyel számolt energia-értéknél, tehát nincs rajta a valódi potenciálfelületen, de ez a probléma szempontjából e ponton nem lényeges. Ami biztos az az, hogy az új magkonfiguráció jelentősen közelebb került az optimális atomelrendeződéshez, s az ehhez az „új” magkonfigurációhoz meghatározva az új SCF függvényt, ismét elérhető a valódi energiafelület. A módszerben az új függvény elektroneloszlását tekintik ekkor konstansnak, s ennek erőterében optimalják ismét a geometriát. Az újabb pszeudo-minimum magkonfigurációjának ismét kiszámítják az SCF-függvényét és ezt mindaddig folytatják, amíg a valódi energiaminimumot (adott tűréshatáron belül) el nem érik. Nyilvánvaló, hogy az egyensúlyi geometriához tartozó valódi energiaminimum és pszeudo-minimum egybeesik.

Az erőter-módszer konvergenciája sokkal gyorsabb, mint a léptetési módszeré [27], különösen akkor, ha a kiindulási geometria távol esik az optimálistól. Ugyanakkor mindössze néhányszor van szükség az iterációs ciklus végigszámítására, mely a számítás gépidőigényét mintegy harmadára csökkenti.

I.4.3. Az erőrelaxációs módszer

Az eddig ismertetett módszerek mindegyike csak az energiagradienseket használta fel, a második deriváltakat nem vette figyelembe. A *Pulay P.* által leírt [20, 28] erőrelaxációs módszer ezt is felhasználja az egyensúlyi geometria egzaktabb és gyorsabb kiszámításához.

Az energiafüggvény második deriváltjait tartalmazó \mathbf{F} erőállandó mátrix (vö. I.2.3.3. fejezet) a $\{\varphi\}$ belső erők deriváltjait tartalmazza. Ha az energia kvadrátikus, úgy egy lépésben megkaphatók a szükséges koordinátaváltoztatások

$$|\Delta\mathbf{q}\rangle = \mathbf{F}^{-1}|\varphi\rangle \quad (58)$$

Minthogy az energiára ez a közelítés legtöbbször nem alkalmazható, ezért iterációt használunk. Ennek során a belső erőket az erőállandó—mátrix módosítására is felhasználjuk. Az elmozdulásokat Descartes-koordinátákban számítjuk, hogy a hullámfüggvény s az energia könnyebben számítható legyen: a konvergencia kritérium itt is az energiaváltozás nagysága.

Az erőrelaxációs módszer egyik előnye, hogy az energiafelület minimumhelyének megkeresése mellett alkalmas az esetleges nyeregpont meghatározására is [29]. Másrészt segítségével végezhető megszorításos geometriaoptimalizálás is: néhány atom koordinátája állandónak vehető, ekkor csak a fennmaradó atommagok helyete fog a számítás során változni.

I.5. Molekulák erőtere és rezgési színeke kvantumkémiai számításának menete. Illesztés a kísérleti adatokhoz

I.5.1. A színeképszámítás menete

A színeképszámítás a (3) szekuláris egyenlet megoldását jelenti. A sajátértékek a frekvenciátényezőket, a sajátvektorok pedig a rezgések alakját adják (vö. az I.1. fejezettel).

Minthogy \mathbf{G} és \mathbf{F} nem ismertek, először ezeket kell meghatározni. Számításukhoz az alábbiakat kell figyelembe venni.

Mindkét mátrix számításához szükséges a molekulageometria ismerete. \mathbf{G} elemei explicit módon is függnék a molekulageometriától [6], \mathbf{F} kvantumkémiai számításához pedig a referencia-geometria (egyensúlyi geometria) ismerete szükséges.

A molekula-geometriát általában kísérleti úton határozzák meg (mikrohullámú spektroszkópia, diffrakciós módszerek). Ezek a geometriák az erőállandószámításokhoz általában jól használhatók [30, 31], meg kell azonban jegyezni, hogy szigorúan véve csak az \mathbf{r}_e -t meghatározó kísérleti eredmények vehetők figyelembe. A kvantumkémiai módszerrel számított geometriák (I.4. fejezet) esetében az egyensúlyi magkonfiguráció biztosan az energiaminimumnak felel meg, ezen geometriák pontossága az alkalmazott módszerek megbízhatóságától függ.

A geometriát ismerve meghatározható a molekula pontcsoportja. Az egyes szimmetriaspecieszekhez tartozó rezgések, illetve szimmetriakoordináták szétválaszthatók, s a számítás a kis dimenziójú blokkokra külön végezhető el.

A szimmetriakoordináták azonban sok esetben meglehetősen bonyolultak. Amellett, hogy így elveszhet az a szemléletes kép a rezgésről, amelyet a belső koordi-

nátakkal történő leírás ad, nagy hátrány, hogy a szimmetriakoordinátákkal kapott erőállandók gyakran nem hasonlíthatók össze hasonló molekulák esetén.

Olyan koordinátákat kell választani, amelyek egyrészt lehetővé teszik ezt az összehasonlítást, illetve biztosítják az erőállandók transzferálhatóságát hasonló molekulák esetén, másrészt módot adnak az anharmonicitást jellemző tagok jellemzésére is.

Pulay, Fogarasi, Pang és Boggs [32] szerint találhatók olyan ún. „lokális belső vegyértékkordináták”, amelyek teljes bázist képeznek s nem redundánsok. Ezen koordináták tulajdonképpen a korábban bevezetett, kötéstávolságokból, kötésszögekből, diéderes szögekből stb. álló belső koordinátákkal (2. ábra), illetve azok lineáris kombinációival azonosak. A továbbiakban belső koordinátáknak a fenti „lokális belső vegyértékkordinátákat” nevezzük.

Az általunk használt, s az erőállandószámításokhoz leginkább alkalmas koordináták megszerkesztésének módja megtalálható a [32] közleményben; a dolgozatban tárgyalta molekulákhoz használt koordinátákat pedig a megfelelő fejezetekben ismer-tetjük.

A koordináták és a geometria ismeretében, az atomtömegek figyelembevételével könnyen meghatározható a G mátrix [6], amely számítás részleteire itt nem térünk ki.

Lényegesen összetettebb az erőállandók mátrixának (F) számítása. A belső koordináták és az egyensúlyi geometria ismeretében ez a számítás a következő lépésekből áll:

- a) A molekula kimozdítandó egyensúlyi helyzetéből az egyes koordináták mentén. Ezek a torzult konfigurációk azokat a valóságban nem létező alakokat mutatják, amelyet akkor venne fel a molekula, ha egy-egy rezgést 100%-ban egy csoport nyújtási vagy hajlítási koordinátájához lehetne rendelni.* Annyi ilyen torzult atomkonfigurációt kapunk, ahány rezgési szabadsági foka van a rendszernek, azaz $3n-6$ -ot, illetve $3n-5$ -öt lineáris molekulák esetén. A kimozdítás során a nyújtási koordinátákat ± 2 pm-el, a hajlítási koordinátákat $\pm 0,02$ radiánnal, a diéderes szögek változását leíró torziós, illetve síkra merőleges deformációs koordinátákat $\pm 0,10$ radiánnal változtattuk. Ezeket a kitéréseket használva a CNDO/2 hullámfüggvényeken nem lép fel numerikus instabilitás [33].**
- b) A belső koordináták Descartes-koordinátákká transzformálandók (I.1.1. fejezet).
- c) Ezt követi az energia számítása, illetve analitikus deriválása (I.2.3.2. és I.2.3.3. fejezet).
- d) A Descartes-erőket a numerikus deriváláshoz belső erőkké kell alakítani (I.2.3.3. fejezet).
- e) Utolsó lépés az erőállandók számítása numerikus deriválással (I.2.3.3. fejezet).

G és F összeszorozása és szimmetrizálás után a sajátértékegyenlet megoldható.

Az erőállandók számítása során megkapható a dipólusnyomaték belső koordináták szerinti deriváltja is. Ezek segítségével kiszámítható az infravörös sávok inten-

* A valóságban a rezgési frekvenciához — amint azt a korábbiakban bemutattuk — egy normálkoordináta rendelhető, ennek alakja azonban összetett, de felbontható belső koordinátákra. A rezgéshez rendelhető belső koordináták százalékos arányáról a teljes energia eloszlása (TED) ad felvilágosítást.

** „ \pm ” azt jelenti, hogy a kitéréseket mindkét irányban elvégeztük. A pozitív és negatív kitérés eredményeként kapott erőállandók összevetése az anharmonicitásról ad felvilágosítást.

zítása is, minthogy az infravörös intenzitás a dipólusnyomaték normálkoordináták szerinti deriváltjának négyzetével arányos. A CNDO/2 módszerrel számított sávintenzitások pontossága nem túl nagy, azonban bizonyos célokra, így az alaprezgések azonosítására támpontul szolgálhatnak [34].

1.5.2. Skálafaktorok, illesztés

A CNDO/2 hullámfüggvényekkel számított nyújtási erőállandók, illetve rezgési frekvenciák abszolút értékei nagyobbak a valóságosaknál, relatív nagyságuk azonban megfelelő. Épp ezért alkalmasan megválasztott paraméterek — ún. „skálafaktorok” (scale factors) — segítségével az erőter, illetve a számított frekvenciák korrigálhatók.

A módszer lényege az, hogy az erőállandó mátrix diagonális elemeit (F_{ii}) egy c_i faktorral, míg a diagonálon kívülieket (F_{ij}) a megfelelő faktorok mértani közepével, $\sqrt{c_i c_j}$ szorozzák. Különböző típusú belső koordinátákhoz (nyújtás, hajlítás stb.) különböző skálafaktorokat használnak.

Érdekes tapasztalat, hogy hasonló molekulák sorozatán belül az erőállandók eltérése szisztematikus, így a skálafaktorok az egyik molekuláról a másikra átvihetők [33, 35—39]. Így nagyon gyakran jó eredmények érhetők el anélkül is, hogy a molekulára specifikus skálafaktorokat határozzanak meg.

A skálafaktorok meghatározása egyébként úgy történik, hogy a számított színeképet a kísérleti színeképhez illesztik. Ennek során olyan c_i -ket határoznak meg, amelyeknél a számított és mért frekvenciák közötti eltérés négyzetösszege minimális.

Az illesztés meggyorsítása érdekében célszerű, ha nem közvetlenül a CNDO-erőállandókból, hanem eleve skálázott erőállandókból indítják a számítást. Ez azt jelenti, hogy a fennálló kémiai hasonlóság alapján az egyes belső koordinátákhoz tartozó irodalmi skálafaktorokat [33, 35—40] az illesztés megkezdése előtt felhasználják.

A számításokban felhasznált skálafaktorok empirikus paraméterek, fizikai tartalmuk nincs. A módszer jelentősége azonban annak ellenére nagy, hogy a fenti néhány empirikus paramétert felhasználja. Különösen a hajlítási erőállandók, illetve a nyújtási-hajlítási kölcsönhatási erőállandók értékeinek meghatározásában játszik nagy szerepet. Ezek az állandók ugyanis csak nagy bizonytalansággal határozhatók meg a kísérletekből. A kísérleti színeképből történő erőállandó-meghatározás során ugyanis a **GF** sajátértékfeladat inverzét kell megoldani: n számú adott frekvenciához $\frac{n(n+1)}{2}$ erőállandót meghatározni. Ez csak nagy elhanyagolásokkal lehetséges.

A nagyszámú erőállandó-paraméter segítségével könnyen illeszthető a számított spektrum a kísérleti spektrumra — a diagonálon kívüli erőállandók átvihetősége más molekulákra azonban érthetően rossz lesz. Amint láttuk, az itt ismertetett módszer, ezzel ellentétben, ezen erőállandók értékét *számítja*, s csupán néhány empirikus paraméter — a skálafaktorok — segítségével illeszti a számított spektrumot a kísérleteire. Összehasonlítva pl. a dolgozatban bemutatott piridin számításához szükséges paramétereket — a 19 síkrezgés leírásához 90 paraméter lenne szükséges a normálkoordinátaanalízisben, s mindössze 5 skálafaktor elegendő a CNDO-számítások során [39] — az utóbbi módszer jelentősége nyilvánvaló.

A CNDO/2 erőmódszer [20—23, 28, 30] molekulák rezgési spektrumának, illetve erőterének számítására történő felhasználhatóságát Török F., Pulay P., Fogarasi G. és mtsainak eredményei [33, 35—39] mutatják.

II. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

Az alábbi irodalmi áttekintés két részre oszlik. Az első rész a DNS, illetve az RNS sugársérülésével, ezen belül a pirimidin bázisok fotokémiai reakciójával kapcsolatos főbb dolgozatok rendszerezése. Ez az összefoglaló (II.1. fejezet) a „Pirimidin bázisok UV fotokémiája” című kutatási programhoz tartozó néhány fontos alapirodalmat foglalja rendszerbe, amely program részfeladatához a dolgozat kapcsolódik. A dolgozat olvasásához ez a fejezet nem elengedhetetlenül szükséges; az ahhoz szorosan kapcsolódó irodalmi előzményeket a második részben (II. 2. fejezet) mutatjuk be.

II.1. A DNS, RNS sugársérülése, a pirimidin bázisok fotokémiai reakciója

Az ultraibolya sugárzás baktériumokra gyakorolt roncsoló hatását *Gates* már 1928-ban a DNS sugársérülésével hozta összefüggésbe [40]. Konkrét bizonyítékokat azonban csak az 1960-as évek hoztak. *Beuker* és *Berends* timin fagyasztott vizes oldatának besugárzása után a fotoproduktumot ciklobután típusú fotodimernek (I. késsőbb) azonosította [41], ugyanezt a fotodimert *Beuker* és *mtsainak* sikerült később a DNS *in vitro* fotoproduktumai között is kimutatnia [42], míg végül ezt a fotodimert UV besugárzott baktériumok (*in vivo*) DNS-ének hidrolizistermékei között is kimutatták (*Wacker, Dellweg és Weinblum* [43].)

Az UV sugárzás biológiai rendszerre gyakorolt roncsoló, illetve genetikus hatását a DNS-ben levő pirimidin bázisok fotokémiai átalakulásainak tulajdonítják [41—44]. Így érthetően nagy hangsúlyt kapott a DNS-, illetőleg RNS-alkotó pirimidin bázisok fotokémiai reakciójának tanulmányozása; ezekről összefoglaló monográfiák is találhatók az irodalomban [45—55].

A pirimidin bázisok fotokémiai reakciójával kapcsolatos kutatások

- a) a reagáló ágensek, illetve a fotoproduktumok szerkezetének felderítésére,
- b) a fotokémiai reakció mechanizmusának tanulmányozására, illetve az ezekhez szükséges jellemzők számítására—mérésére, eszközök kifejlesztésére stb. terjedtek ki.

A vizsgálatok változatos kísérleti körülmények között, sokféle eszköz, módszer felhasználásával folytak. Röviden összefoglaljuk ezeket — külön kiemelve a dolgozathoz kapcsolódó infravörös spektroszkópiát —, mielőtt a szerkezetkutató munka eredményeire, illetve a fotokémiai reakcióval kapcsolatos kutatásokra rátérnénk. Az összeállításban a fő hangsúlyt az uracil kapta, amelyre kvantumkémiai számításainkat végeztük.

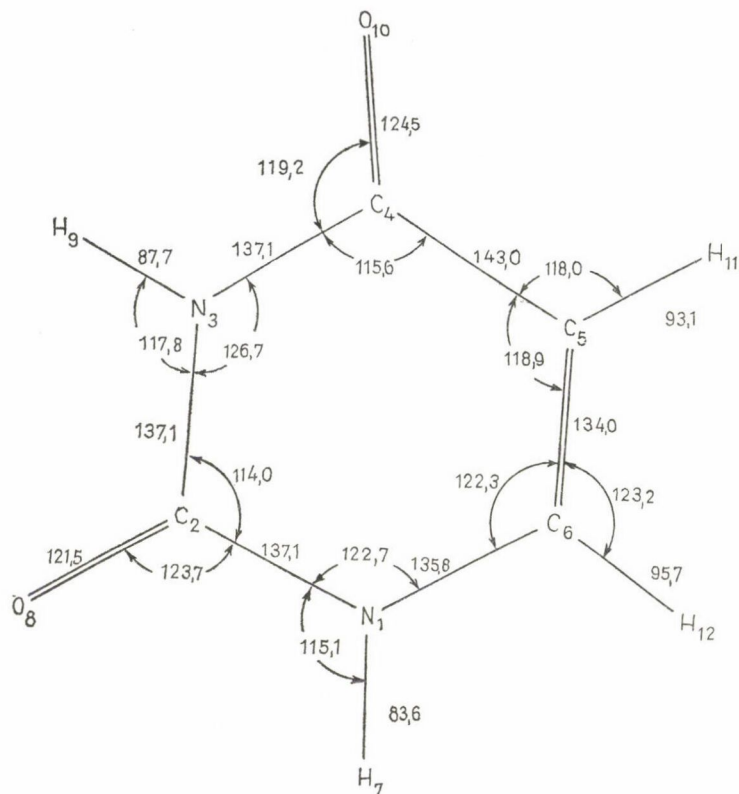
II.1.1. Kísérleti körülmények

A sugársérülés vizsgálatához olyan kísérleti körülmények választandók, amelyek

- a) megfelelően modellezik a biológiai rendszert,
- b) lehetővé teszik az abszorbeált dózis pontos meghatározását,
- c) biztosítják, hogy a termékek szerkezete a vizsgálat előtt és alatt ne változzon.

A biológiai rendszerek vizes oldatok. Az első munkákban vizes oldatokat, illetve fagyasztott vizes oldatokat használtak.

Sinsheimer és Hastings 1949-ben azt észlelték, hogy uracil vizes oldatának besugárzása reverzibilis reakcióval olyan fotoproduktumot ad, amely hő vagy sav hatására ismét elbomlik [56]. A fotoproduktumot *Moore és munkatársai* azonosították [57, 58]: az uracil vizet addicionált az 5,6 kettőskötésre (az atomok számozása a 3. ábrán látható). A reakciót egyéb uracilszármazékokra (pl. 1,3-dimetil-uracil) is igazolták [57, 58].



3. ábra. Az uracilmolekula röntgendiffrakcióval meghatározott kötött állapotú szerkezete a kristályban [84]

Amint említettük, az első ciklobután típusú fotodimereket timin fagyasztott vizes oldatában sikerült azonosítani [41], nem sokkal később ugyanilyen reakciót uracillal is sikerült *Wang*nak lejátszatnia [59, 60].

Később azonban, megfelelő kísérleti körülmények mellett, ismét vizes oldatokat is besugároznak, s a két módszert kombináltan alkalmazzák. Ilyen eredmények bőven találhatók az irodalomban, mind a timinre [61, 62], mind az uracilra [63—70]. Sőt nagyobb molekulákra is: *Varghese* citozin nukleozidokat [71, 72], valamint RNS-t is vizsgált [73—75], *Wierzchowski és Shugar* [76], illetve *Pearson és Johns* [77] szintetikus polinukleotidokat.

A vizes oldatokban, illetve fagyasztott vizes oldatokban történő besugárzás egyéb kísérleti körülményei a [78] dolgozatban részletesen megtalálhatók. A fotoproduktumok elválasztására oszlop-, papír- és vékonyréteg-kromatográfiát használnak [70].

A fotoproduktumok azonosítása, a fenti módszerek alkalmazása esetén, elválasztás után történik, s az utókezelés módosíthatja a szerkezetet. A fagyasztott vizes oldatok külön hátránya, hogy benne a konformációviszonyok eltérnek a molekulák DNS-ben levő konformációjától, valamint az, hogy ebben a közegben nagy a fény-szórás.

Fentiek mellett *Varghese* nukleotid bázisok, illetve nukleotidok párologtatott szilárd fázisú vékonyrétegében lejátszódó reakciókat is vizsgált [70]; a fotoproduktumokat ez esetben oldatba vitel, majd szétválasztás után a korábbi módszereknél említettek szerint azonosította.

A pirimidin bázisok szublimációval előállított vékony filmje [79] azonban új vizsgálati módszert tesz lehetővé. A vékonyrétegek rendelkeznek a kísérletek szempontjából két nagyon jó tulajdonsággal: egyrészt a rétegekben a karakterisztikus molekulatávolságok a biológiai rendszerekben levőkkel jól egyeznek (1. ábra), másrészt a rétegek abszorpciós spektroszkópia segítségével — így infravörös spektroszkópiával is — vizsgálhatók. Megfelelő módon besugározva a vékonyrétegeket, a fotokémiai reakció a keletkezés helyén, *in situ* vizsgálható.*

Ilyen kísérletekre először a SOTE Biofizikai Intézetében került sor (l. *Fidy és mtsai* [82, 83]).

II. 1.2. Fizikai—kémiai vizsgálati módszerek

II.1.2.1. A módszerek felsorolása

A pirimidin bázisok geometriai paramétereit, valamint a fotodimerek szerkezetét röntgendiffrakcióval határozták meg [84—86].

A fotokémiai reakció követésére vékonyrétegekben UV [82, 83] vagy IR spektroszkópiát [87—89] használnak. UV és IR spektroszkópiával vizsgálták a fagyasztott vizes oldatokat [41], [59], [60], [70], [78] s az egykristályokat is [90]. Előbbi esetekben a dimereket papír-, oszlop- és vékonyrétegekromatográfia segítségével választották el [70, 78]. A dimereket mágneses spektroszkópiával (tömegspektroszkópia, NMR) is vizsgálták [91].

Részletesen a rezgési spektroszkópia alkalmazásáról szólunk.

II.1.2.2. A rezgési spektroszkópia alkalmazása

A biológiai rendszerek makromolekuláit, illetve azok alkotóit gyakran vizsgálták rezgési spektroszkópiával. Főleg infravörös technikával végezték a vizsgálatokat, s minthogy ezek az anyagok szobahőfokon általában szilárdak, oldatban [92], KBr vagy CsI pasztillában [93], por alakban [81] vagy alacsony hőmérsékleten, nemesgázok mátrixában [94], illetve nitrogénmátrixban [94] mérték őket.

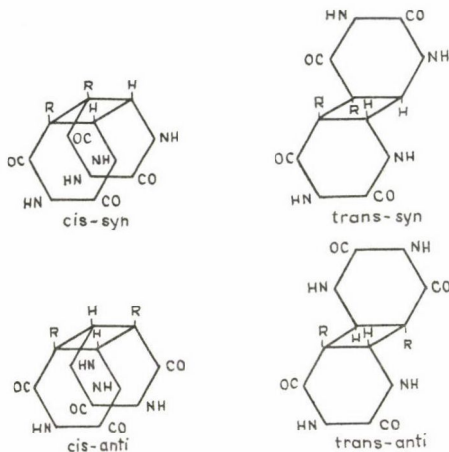
* Megjegyzendő, hogy a vékonyrétegekben a levegő nedvességtartalma szerkezeti változást okoz [80, 81], valamint az, hogy az anyag szobahőmérsékleten néhány nap alatt átkristályosodik [56].

Ugyanakkor a reális folyamatok vizes oldatokban folynak, s fontos lenne ezeket a molekulákat vizes oldatokban is vizsgálni, s ezáltal olyan fontos tulajdonságokat tanulmányozni, mint a pH-függés vagy a hőmérsékletfüggés. Az anyagok kicsiny vízdoldhatósága, valamint a víz erős IR abszorpciója következtében azonban az IR spektroszkópia gyakorlatilag alkalmazhatatlan.

Ezeket a hátrányokat a Raman-spektroszkópia küszöböli ki. Utóbbi külön előnye, hogy (1) egyetlen készülékkel a teljes spektrumtartomány könnyen mérhető, (2) a monokromatikus fényforrás tökéletesen polarizált, s így mód van a rezgések szimmetriájának meghatározására is, és (3) a kombinációs rezgések intenzitása kicsiny a normálrezgésekéhez képest, ezáltal azok azonosítása egyszerűbb.

A nukleinsavak, illetve alkotórészeinek Raman-spektroszkópiája mellett [95—97] az utóbbi időben összefoglaló jelent meg rezonancia Raman-spektroszkópiájukról [98] is.

Az infravörös technika fent említett hátrányai is kiküszöbölhetők azonban bizonyos körülmények között. Amint a II.1.1. fejezetben szó esett már róla, az IR-spektroszkópiát jól lehet vékonyrétegek vizsgálatára használni [56], az a párologtatott vékonyrétegekben lejátszódó reakciók *in situ* követésére alkalmas [87—89]. Ekkor a vékonyréteg jó modellje a biológiai rendszernek (vö. 1. ábra), s a víz a kísérletből eliminálható. Néhány pirimidin bázisról pl. uracil, 6-metiluracil készültek ilyen körülmények között infravörös és polarizációs IR-felvételek [87—89] különböző fotodi-



4. ábra. Az uracil és a timin dimerjének sztereoizomerjei
(R=H: uracil; R=CH₃: timin)

merjeik (4. ábra) IR színeképét Varghese [70, 78], valamint Jennings és mtsai [105] publikálták.

A nukleinsavak IR-vizsgálatáról Shimanouchi és mtsai [99], valamint Tsuboi és mtsai [100] közölnek átfogó összefoglalót. Ezeknek a munkáknak igen részletes irodalomjegyzéke tartalmazza a pirimidin bázisokra vonatkozó referenciákat is.

Magáról a pirimidinről Allenstein és mtsai [101], Milani-Nejad [102], valamint Sbrana és Califano [103] közölnek infravörös spektrumokat, illetve azok besorolását.

II.1.3. Szerkezet

Watson és Crick [108], illetve Wilkins [109] írták le először a DNS kettős spiráljának szerkezetét, amelyet az adenin-timin, guamin-citozin bázispárok hidrogénkötései tartanak össze. Hoogsteen [110, 111] és O'Brien [112] kristályokban egyéb ilyen bázispárokat is talált.

A nukleinsavak sztereokémiájával azóta is foglalkoznak. Spencer 1959-ben röntgendiffrakciós méréseinek magyarázatához olyan molekulamodellt javasolt, amelynek

alkotó alapegységeit állandónak vagy kis határok között változónak tekintette [113]. Ezek az alegységek pl. a nukleotid bázisok: közli a kötőhosszakokat és a kötőszögeket. A nukleinsavak diffraktogramját az utóbbi adatok alapján számítja, s a kísérleti diffraktogrammal összehasonlítja. A modell paramétereit optimális egyezésig finomítja. Miles 1964-ben polinukleotidok IR spektrumát tanulmányozva a harmadlagos helixszekezetre tesz javaslatot [114]. Bugg és mtsai purin és pirimidin bázisok elhelyezkedését, illetve átfedését vizsgálták kristályos fázisban [115].

Az alábbiakban néhány pirimidin bázis, illetve fotodimer kristályos és molekulaszerkezetét bemutató dolgozatot említünk meg.

II.1.3.1. A pirimidin bázisok szerkezete

A timin kristály- és molekulaszerkezetét Gerdil [116], az 1-metil-timinét Hoogsteen [111], az 1-metiluracilét pedig Green és mtsai írták le [117] röntgendiffrakció segítségével.

Az uracil kristályszerkezetét először Parry határozta meg hasonló módon [118], 1954-ben. Stewart és Jensen 1967-ben újra meghatározták a kristály- és molekulaszerkezeteket [84]: eszerint az uracil síknak tekinthető, gyűrűje a (001) kristálytani síkkal $6^\circ 9'$ -es diéderes szöget zár be. A gyűrűk síkjainak távolsága 365 pm, ami az RNS-beli gyűrűtávolsággal jól egyezik (1. ábra).

A molekulaparamétereiket a 3. ábrán tüntettük fel.

II.1.3.2. A fotodimerek szerkezete

Az addíció során négyféleképpen kapcsolódhat egymáshoz két pirimidin bázis gyűrűje:

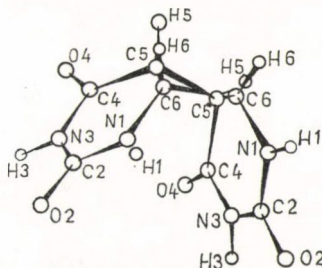
a) egymáshoz viszonyítva a két gyűrű lehet *cis* és *trans* helyzetben,

b) az addíció során az egyik gyűrű 5-ös atomja kapcsolódhat a másik gyűrű 5-ös, illetve 6-os szénatomjához. (Ekkor az első gyűrű 6-os szénatomja nyilván a másik gyűrű 6-os szénatomjához — illetve második esetben 5-ös szénatomjához kapcsolódik: „fej—fej”, illetve „fej—láb” kapcsolatok alakulnak ki.) Előbbi a *syn*, utóbbi az *anti* konfiguráció.

A timin ($R=CH_3$) és az uracil ($R=H$) négyféle fotodimerjét mutatja a 4. ábra.

Noha a besugárzás körülményeitől függően valamennyi sztereoizomer előállítható [70], biológiai szempontból a *cis-syn* izomer a legfontosabb: a DNS-ben is ilyen típusú fotodimer keletkezik UV besugárzás hatására [73, 119, 120]. A DNS-ben reagáló pirimidin bázis, az 1,3-dimetil-timin fotodimerjének kristály-, illetve molekulaszerkezetét Camerman és Camerman [121, 122] egykristály-diffraktométerrel határozta meg.

Uracil-vékonyrétegek besugárzása során ugyancsak a *cis-syn* fotodimer keletkezik, amint azt az *in situ* infravörös felvételek bizonyították [87–89]. Az uracil *cis-syn* fotodimerjének szerkezetét Adaman, Gordon és Jensen [85] írta le. A hajlított ciklobután gyűrűn helyezkedik el az uracilmolekula, amint az az 5. ábrán látható, a diéderes szög 23° .



5. ábra. Az uracil *cis-syn* dimerjének térszerkezete

Az uracil-dimerek közül a *cis-syn*, a *cis-anti* és a *trans-syn* dimert sikerült *Fisher*-nek és *Johns*-nak [123] előállítania és azonosítania, *Konnert* és *mtsai* fagyasztott uracil fotoproduktumai közül izolálták a *cis-anti* dimert [124].

Ami a többi pirimidin bázist illeti, *cis-anti* timint *Witkop* mutatott ki [125]. A *cis-anti* termékek mindkét esetben savra érzékenynek bizonyultak [70, 125]. A citozint *Wang* és *Varghese* tanulmányozták [126, 127]. *Wang* és *mtsai* [128, 129] a 6-metil-uracilt vizsgálták. Mind a négy sztereoiszomert asszignálták az NMR, IR spektrum, illetve az eltérő kémiai reaktivitás alapján; [128]-ban a *cis-syn*, [129]-ben a *cis-anti* izomer röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálatának eredményeit közlik.

II.1.4. A fotokémiai reakció

A pirimidin bázisok UV sugárzás hatására cikloaddícióval a 4. ábrán bemutatott négyféle fotodimerré alakulhatnak. A különböző kísérleti körülmények egyik vagy másik termék keletkezésének kedveznek (pl. [123]-ban négy sztereoiszomer, [66]-ban a *cis-syn* keletkezik; vö. a II.1.1. és II.1.3. fejezetekkel).

A fotodimerizáció bimolekuláris reakcióval játszódik le, amelynek során az alapállapotú molekula egy első gerjesztett állapotban levő molekulával lép kölcsönhatásba. A reakció során előbb gerjesztett állapotú, metastabil intermedier keletkezik [130]:



Feltételezések szerint a sebességhatározó lépés az (1).

A kísérleti feltételek szabják meg, hogy a gerjesztett molekula szinglett vagy triplet állapotban van-e [123]. Szilárd fázisban szinglett állapot [123], folyadék fázisban — a hosszabb élettartam miatt — triplet állapot alakul ki [131, 132].

Az első gerjesztett állapotban szabad vegyérték az 5-ös és 6-os C-atomon alakul ki (vö. 3. ábra), az elektrogerjesztés pedig az 5-ös és 6-os C-atom között lokalizálódik [133].

A reakciókat egyrészt csak határorbitálok („frontier molecular orbitals”) figyelembevételével [134], másrészt a Π elektronok, valamint az átfedések explicit figyelembevételével [135] tárgyalták.

A határorbitálok elméletének periciklusos reakciókra történő alkalmazásáról *Houk* készített összefoglaló monográfiát [136].

A reakció kinetikus viselkedésének elméleti leírását *Pullman* és *Mantione* [137, 138], illetve *Bertran* [139] adta. A számítási módszert *Bertran* és *mtsai* ismertetik [140].

A delokalizációs energiák értéke *Bertran* szerint összefüggésben van a dimerképződéssel [139], s kinetikusan a *cis-syn* izomer keletkezésének kedveznek [134, 139]. A *Hückel*-módszerrel [141] végezve a számítást, szintén a *cis-syn* sztereomer adódik a legstabilabbnak [139].

A különböző konformációjú végtermékek stabilitására *Jordan* és *Pullman* [142], illetve *Einstein* és *mtsai* [143] végeztek energiaszámításokat.

A reakciók kinetikus tárgyalása során az idézett munkák [134, 137, 138, 139] M^* molekulának csak az első gerjesztett állapotát tekintik, de nem tesznek különbséget a szinglett és a triplet állapotok között.

Danilov nyílt héjú SCF LCAO—MO módszerrel [144—146] a pirimidin bázisok legalacsonyabb szinglett és triplett állapotának elektronszerkezetét is kiszámította [133], ugyanúgy, mint *Imamura* és *mtsai* [147].

A piridin bázisok elektronszerkezetét *Zseltovszkij* és *Danilov* [148] CNDO/2 módszerrel, *Berthod* és *mtsai* a PPP-módszerrel [149], *Pullman* és *mtsai* [150, 151] *ab initio* módszerrel számították ki. (Újabban *ab initio* eredményeket purin bázisokra is közöl az irodalom [152].) A DNS-ben levő bázispárok (A—T, C—C) első gerjesztett állapotát *Danilov* és *Zseltovszkij* [153], a közöttük ható kölcsönhatási energiát *Geller* és *mtsai* [154] számították ki.

A konkrét példákat, azaz az egyes pirimidin bázisok fotokémiai reakcióival foglalkozó dolgozatokat az alábbiakban soroljuk fel.

A pirimidin bázisok fotokémiai reakciójához hasonló reakciót, az α , β telítetlen ketonok cikloaddícióját, *Chapman* és *mtsai* [155], míg a pirimidin mechanizmusát *Wagner* és *Buchbeck* [132], illetve *Lamola* és *Mittal* [156] írták le. A pirimidin bázisok fotokémiáját *Burr* foglalta össze [51].

Különböző bázis-összetételű DNS-ek besugárzása során legnagyobb mennyiségben a timin-timin dimer keletkezett, a kevesebb timin-citozin vegyes dimer, a még kevesebb citozin-citozin dimer mellett [157]; az RNS besugárzása során uracil-uracil dimer is keletkezik [73—75]. Gyakoriságuknak megfelelően előbb a timin, majd a citozin, végül az uracil fotoaddíciójával foglalkozó dolgozatok közül sorolunk fel néhányat. Részletekre nem térünk ki, mert a dolgozatok jórészt a korábbi fejezetekben szerepelnek.

Mindhárom pirimidin bázis fotokémiai reakcióját tárgyalja *Smith* [158] korai munkájában. A timin fotodimerizációjával *Beukers* [41], *Wang* [59] foglalkozott, a reakciómechanizmussal *Nagata* és *mtsai* [134]. A citozinnal *Wang* és *Varghese* [126, 127], *Freeman* és *mtsai* [159], valamint *Danilov* [133] és *Bertrán* [139]. Az uracil cikloaddícióját *Wang* [59], *Swensen* és *Setlow* [160] valamint *Brown* és *mtsai* [161] írják le. A reakció elméletét *Danilov* [133] és *Bertrán* [139] említett munkái tárgyalják.

II.2. Az uracil kísérleti rezgési színeképének irodalma

Az uracil első — vékony film alakban felvett — infravörös színeképét *Sinsheimer* és *Hastings* [56] közölte, 1949-ben. Az uracil fagyasztott vizes oldatáról *Wang* [49, 60] készített IR-színeképet.

A rezgési sávokat elsőként, 1961-ben, *Angell* [1] rendelte a különféle rezgésmódokhoz. Besorolását később *Susi* és *Ard* [104] pontosította az uracil és a deuterált uracilszármazékok IR és Raman színeképe alapján.

A színeképek alapján *Szmorigo* és *Ivin* [92], *Susi* és *Ard* [104], valamint *Tsuboi* [100, 107] határoztak meg kísérleti erőállandókat.

Szilárd, polikristályos uracilmintákat, illetve nujolos szuszpenzókat *Angell* [1], *Szmorigo* és *Ivin* [92], *Lord* és *Thomas* [95], valamint *Susi* és *Ard* [104] vizsgálták: pH- és hőmérsékletfüggést bemutató infravörös színeképeket *Szuhorukov* és *mtsai* [93] készítettek.

Az uracil vékonyrétegekről *Gumenyuk* és *mtsai* [81], valamint *Dobos* és *mtsai* [87—89] közölnek infravörös színeképet. Utóbbiak a vákuumpárologtatással hordo-

1. TÁBLÁZAT
Az uracil kísérleti frekvenciái

Kísérleti besorolás [104]	Angell, 1961. [1] IR, szil.	Lord—Thomas, 1967. [95] Raman, szil.	Susi—Ard, 1971. [104]		Szomorigo— Ivin, 1975. [92] IR, szil.	Dobos et al., 1978. [87] IR, nujol	Dobos et al., 1979. [89] IR, szil. (ATR)
			IR nujol	Raman, szil.			
Síkrezgések							
1. N—H nyújtás (fázisban)					3130	3220 sh	3220 w
2. N—H nyújtás (ellentett fázisban)	3080 s*		3160 m	3130	2930	3180 sh	3175 w
3. C—H nyújtás (fázisban)			3100 s	3100	3105	3100 vs	3115 s
4. C—H nyújtás (ellentett fázisban)	2924 m		3080 s	3085	3092	3080 m	3087 sh
5. C ₂ =O nyújtás	1724 s	1710	1716 s	1662	1732	1718 vs	1719 vs
6. (C ₄ =O + C=C) nyújtás (fázisban)	1681 m	1650	1675 s	1648	1666	1673 vs	1677 vs
7. (C ₄ =O + C=C) nyújtás (ellentett fázisban)	1666 m	1620	1645 w	1611	1623	1645 s	1650 sh
8. N—H def. (fázisban)	1508 m	1508	1508 m	1507	—	1510 m	1510 m
9. gyűrű def.	1451 s	1460	1453 s	1463	1454?	1455 s	1455 s
10. N—H def. (ellentett fázisban)	1418 s	1423	1417 s	1422	1390	1417 vs	1418 vs
11. C—H def. (fázisban)	1389 m	1398	1390 m	1398	1418	1390 m	1390 m
12. C—H def. (ellentett fázisban)	—	—	1217 s	—	1218	?	1215 sh
13. gyűrű def.	1238 s	1237	1238 w	1236	1240	1238 s	1237 vs
14. gyűrű def.	1099 w	1109	1099 w	1104	1095	1099 w	1098 w
15. gyűrű def.	1044 s	1011	1003 m	1010	1005	1006 m	1004 w
16. gyűrű def.	994 s	987	993 m	988	994	994 m	993 w
17. gyűrű def.	—	791	781 w	792	782	780 w	782 vw
18. gyűrű def.	—	—	585 m	597	722	584 m	585 w
19. C=O def. (fázisban)	—	580	565 m	558	575	564 m	566 m
20. gyűrű def.	—	560	550 s	540	—	545 s	547 s
21. C=O def. (ellentett fázisban)	—	433?	—	398	422	434 m	436 m/s

Síkra merőleges rezgések							
1. N—H síkra merőleges def.	851 m	—	851 m	867		853 m	854 m
2. C—H síkra merőleges def.	822 s	—	822 s	830		822 s	822 m
3. N—H síkra merőleges def.	807 w	—	807 w	—		810 sh	804 w
4. C—H síkra merőleges def.	760 m	—	760 s	—		760 m	—
5. gyűrű torzió	781 w?	—	728 vw	774		728 sh	730 vw
6. gyűrű torzió	—	537	530 s	531		531 sh	561 sh
7. gyűrű torzió	—	433?	435 s	431		434 sh	427 sh
8. gyűrű torzió	—	120	—	98		—	—
9. gyűrű torzió	—	72	—	70		—	—

* vs=very strong (igen erős sáv); s=strong (erős sáv); m=medium (közepesen erős sáv); w=weak (gyenge sáv);
vw=very weak (igen gyenge sáv); sh=shoulder (váll)

zókra vitt mintákat nem csupán áteső fényben vizsgálták [87], hanem többszörös belső reflexió (ATR)* módszerrel is [89].

Gázfázisban készült rezgési színképet nem közöl az uracilról az irodalom.

A főbb munkák eredményeit az I. táblázatban foglaltuk össze. Láthatóan jól egyeznek általában a frekvenciaértékek, néhány esetben azonban tapasztalható eltérés is (pl. az N—H nyújtások, vagy a $C_2=O$ nyújtások IR és Raman értékei között), s az intenzitások is különbözhetnek (pl. a $(C_4=O + C=C)$ ellentett fázisú nyújtás esetében: a rezgést majd mindegyik szerző más intenzitásúnak találta). A jelentősebb eltéréseket a táblázatban kiemeltük.

A frekvenciaeltérés oka lehet egyrészt az, hogy a szerzők eltérően sorolnak be be sávokat: példa erre az I. táblázatban 18-as sorszámmal jelzett rezgés, a gyűrű síkbeli deformációs vázrezgése. E rezgéshez a táblázatban hivatkozott dolgozatok szerzői egy kivétellel az 585 cm^{-1} körül jelentkező sávot rendelik, csak *Szomorigo* és *Ivin* [92] sorolja ide — tévesen — a 722 cm^{-1} -es sávot, megjegyzendő, hogy a többi szerző szerint a 722 cm^{-1} -es sáv síkra merőleges deformációs rezgés eredménye. A frekvencia-, illetve intenzitáseltérés oka lehet másrészt az is, hogy az uracilmolekulák környezete a különféle kristályos mintákban más és más lehet, s a környezet hatása is jelentkezik a színképen. A kristályos anyagról készített rezgési színképekben ezek alapján nem elhanyagolható környezeti hatások is jelentkezhetnek.

A környezeti hatásokkal és a kísérleti besorolások értékelésével az izolált molekula rezgési színképének ismeretében a IV.2.6.7. fejezetben foglalkozunk.

III. CÉLKITŰZÉS

Hazánkban a pirimidin bázisok fotodimerizációjának vizsgálatával közös, koordinált kutatási program keretében több kutatóintézet foglalkozik. E program egyik célja a fotodimerizáció *in situ* tanulmányozása, amely párologtatással kapott szilárd fázisú vékonyrétegekben [82, 83] végezhető. Az ultraibolya fény hatására bekövetkező fotokémiai reakció infravörös spektroszkópiás módszerekkel követhető [87—89].

Ez utóbbi vizsgálat során merült fel az igény a vékonyréteg szerkezetének pontosabb megismerésére, az abban található bázis molekulák közötti kölcsönhatások jellemzésére. Ha ugyanis a bázis a környezetével erős kölcsönhatásban van, a topokémiai környezet a reakció lefolyását is döntően befolyásolhatja.

A környezettel való kölcsönhatás mértéke szemléletesen kitűnik két spektrum összehasonlításából: a kötött állapotot jellemző kristályos fázisú felvétel és a szabad állapotot leíró gázfázisú felvétel összevetéséből.

Laboratóriumunkban a vizsgálatokat az RNS-ben található uracillal kezdtük. Azt tapasztaltuk, hogy amíg kristályos állapotú uracilról bőven közöl felvételeket az irodalom (pl. [1]), addig nincs közlemény az uracilgőz spektrumáról. Ekkor határoztuk el, hogy kiszámítjuk az uracilgőz rezgési spektrumát.

* Az ATR-mérések előnye, hogy segítségükkel mindössze néhány tized mikrométer vastag réteg vizsgálható, szemben a $10\text{--}50\text{ }\mu\text{m}$ -es rétegvastagságot igénylő transzmissziós mérésekkel. Ha e rétegeket UV fényel sugározzák be, az előbbi vékony rétegben fotodimerizáció következik be, az utóbbi, vastag rétegben a nagy önabszorpció miatt ez a reakció azonban csak igen korlátozott mértékben játszódik le.

Célunk az izolált, gázfázisú uracil rezgési színeképének meghatározása mellett az volt, hogy a kristályos uracil színeképének alaprezgéseit is pontosan besoroljuk, s megbízható képet kapjunk a molekula erőteréről.

A feladat megoldásához alkalmazott számítási módszert előbb a legegyszerűbb nitrogéntartalmú hatos gyűrűs vegyület, a piridin esetében próbáltuk ki. Ez izoelektronos a benzollal és a pirimidinnel, s így a számítás felvilágosítást ad a nitrogén heteroatomnak a molekula erőterére gyakorolt hatásáról, illetve arról, mennyiben transzferábilisek az erőállandók izoelektromos molekulák esetén.

Az uracil molekulára végzett geometriaszámítások (l. később) azt mutatták, hogy a kettőskötések sokkal lokalizáltabbak, mint a pirimidin esetében, így olyan összehasonlító vegyületet kerestünk, amely nagyobb szerkezeti rokonságot mutat az uracillal, ugyanakkor az irodalomban gőzspektrumát is közölték már. Ilyen vegyület a maleinimid, amelyre az erőter-, illetve a színeképszámítást szintén elvégeztük a CNDO/2 módszerrel.

A maleinimid számított és kísérleti frekvenciáinak összehasonlítása során nyert skálafaktorok az uracil CNDO-erőterére alkalmazva olyan erőállandókat eredményeztek, amelyek alapján az uracilgőz színeképét megfelelő pontossággal lehetett megjósolni. Ezt az igazolta, hogy a számított színekép a külföldi kooperáló partnerünk által a közelmúltban felvett kísérleti gőz-színeképpel [162] kielégítő pontossággal egyezett.

IV. EREDMÉNYEK

IV.1. A piridin síkbeli erőterének és rezgési színeképének számítása

A számítás első lépése a kiindulási geometria meghatározása. A piridin esetében azokat a geometriai paramétereket vettük figyelembe (l. 2. táblázat), amelyeket *Bak és mtsai* [163] mikrohullámú mérések alapján közöltek.

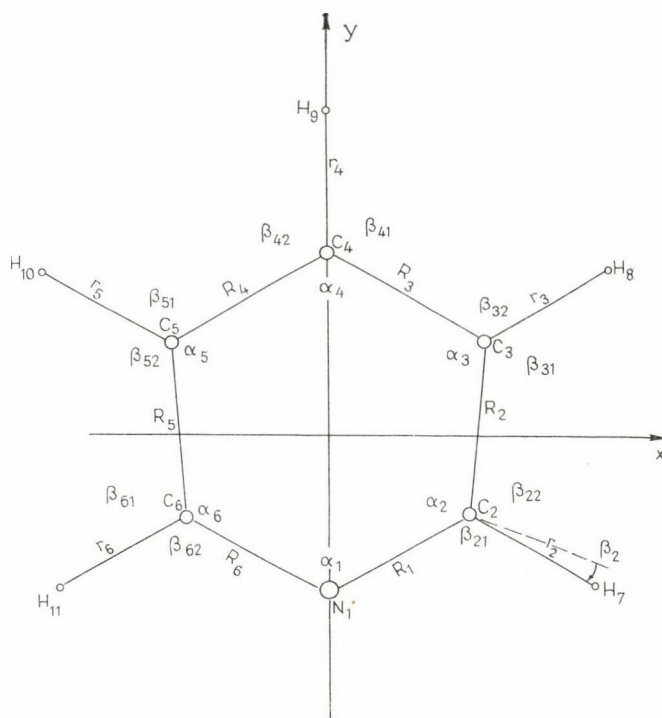
A piridin molekula alakját a 6. ábra mutatja. Az ábrán feltüntettük a belső koordinátákat is.

A planáris piridin molekula szimmetriaelemei (egy digir és két egymásra merőleges tükörsík, amelyek tartalmazzák a digirt) alapján a C_{2v} pontcsoportba tartozik.

2. TÁBLÁZAT

A piridin atommagjainak koordinátái [163]
a 6. ábra koordináta-rendszerében

	x (pm)	y (pm)
H ₇	205,57	-127,61
H ₈	215,26	120,55
H ₉	0,0	249,24
N ₁	0,0	-139,49
C ₂	114,16	-69,29
C ₃	119,74	-70,05
C ₄	0,0	141,51



6. ábra. A piridinmolekula alakja, atomjainak számozása és a számításhoz definiált belső koordináták ábrázolása (vö. a 2. és 3. táblázattal)

A síkbeli rezgések az A_1 és a B_1 specieszbe tartoznak: a 19 síkbeli normálrezgés közül 10 A_1 és 9 B_1 szimmetriájú. Valamennyi rezgés megjelenik mind az infravörös, mind a Raman színeképben.

A 19 nem redundáns belső koordináta kiválasztása [32] alapján történt: a koordináták a 3. táblázatban találhatók.

3. TÁBLÁZAT
A piridin belső koordinátái

A belső koordináták sorszáma	Típus	A koordináta definíciója	A koordináták jelentése
1, 2, 3, 4, 5, 6	nyújtás	ΔR_i ($i=1\dots6$)	A C_2-N_1 , ill. a C_6-N_1 kötések, valamint a C_i-C_{i-1} ($i \neq 1, 2$) kötések hosszának változása
7, 8, 9, 10, 11	nyújtás	Δr_i ($i=2\dots6$)	A C_i-H_{i+5} kötések hosszának változása
12, 13, 14, 15, 16, 17	hajlítás hajlítás	$\beta_i = \beta_{i2} - \beta_{i1}$ ($i=2\dots6$) $\bar{\alpha}_1 = \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_6$	A HCC kötésszögek változása
18	hajlítás	$\bar{\alpha}_2 = 2\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + 2\alpha_4 - \alpha_5 - \alpha_6$	A CCC kötésszögek változása
19	hajlítás	$\bar{\alpha}_3 = \alpha_2 - \alpha_3 + \alpha_5 - \alpha_6$	A CCC kötésszögek változása

VI.1.1. A piridin molekula erőtere

Az I.5. fejezetben ismertetett módon kiszámítottuk a piridin erőállandóit. A magok kitérítése során a nyújtási koordináták ± 2 pm-el, a hajlítási koordináták pedig $\pm 0,02$ rad-al változtak. Az így kapott magkonfigurációkhoz tartozó energiát a CNDO/2 közelítéssel számítottuk: az erőállandók számítására az erőmódszert alkalmaztuk.

A CNDO/2 közelítés szisztematikus hibái miatt a CNDO-erőállandókat az I.5.2. fejezetben ismertetett korrekciós eljárással módosítani kell.

A piridin korrekciós faktorainak (skálafaktorainak) kiszámítása előtt megvizsgáltuk: alkalmazhatók-e jelen esetben is a benzolra és a benzolszármazékokra már korábbról ismert [33] skálafaktorok. Eljárásunkat igazolni látszott, hogy a normálkoordináta-analízisben gyakran felhasználták a piridin és a benzol közötti — a N és a CH csoport izoelektronossága miatt fennálló — hasonlóságot. (L. pl. [164].) Ugyanakkor meg kell említeni, hogy míg a fenti dolgozatokban a benzol *erőállandóit* alkalmazták a piridinre, a jelen esetben a piridin teljes erőterét külön számítottuk a CNDO/2 erőmódszerrel, s csupán a benzolra alkalmazott *négy skála faktort* [33] — amelyek rendre a CH nyújtási, a CC nyújtási, a CCH hajlítási és a CCC hajlítási koordinátákhoz kapcsolódnak — használtuk fel (4. táblázat).

4. TÁBLÁZAT

A benzol erőterének, illetve frekvenciáinak számításához felhasznált skálafaktorok értékei [33]

Tipus	Érték
c(CH)	0,382
c(CC)	0,382
c(CCH)	0,787
c(CCC)	1,19

A piridinre itt: $c(\text{CN}) = c(\text{CC})$.

5. TÁBLÁZAT

A piridin erőterének, illetve frekvenciáinak számításához használt skálafaktorok értékei

Tipus	Érték
c(CN)	0,320
c(CC)	0,344
c(CH)	0,380
c(CCH)	0,813
c(CCC)	1,14

A nitrogén befolyása az erőterre azonban jelentős, lényegesen összetettebb, semhogy a piridin erőtere ilyen egyszerű módon közelíthető lenne, mivel a kapott F -mátrixszal számított frekvenciák jelentősen eltérnek a kísérleti értékektől (vö. a 7. táblázattal). A korrekciós faktorok értékeit a piridinre külön kell meghatározni.

Ha a CN nyújtásra új skála faktort vezetünk be, s a többi úgy változtatjuk, hogy a számított frekvenciák legkisebb négyzetes értelemben a kísérletiekre illeszkedjenek, az 5. táblázatban felsorolt skálafaktorok adódnak.

Minthogy a CNDO-számítások hibája a nyújtási koordinátákra szisztematikus, az várható, hogy a különböző molekulák azonos típusú nyújtásaihoz tartozó skála faktorok értéke közel azonos. Amíg azonban a $c(\text{CH})$ például alig változik különböző molekulák esetén ([30], [33], [37]), a CC nyújtáshoz tartozó faktort az N heteroatom már befolyásolja, s az mintegy 10%-ot meg is változik. A hajlítási koordinátákhoz tartozó skála faktorok változása nehezebben magyarázható, minthogy ezek hibája kevésbé szisztematikus.

Jelölés	ΔR_1	ΔR_2	ΔR_3	ΔR_4	ΔR_5	ΔR_6	Δr_2	Δr_3	Δr_4
ΔR_1	7,155 (22,337)								
ΔR_2	0,833 (2,512)	6,155 (17,910)							
ΔR_3	-0,405 (-1,222)	0,757	6,208 (18,063)						
ΔR_4	0,452 (1,365)	-0,383	0,763	6,208 (18,063)					
ΔR_5	-0,397 (-1,198)	0,381	-0,383	0,757	6,155 (17,910)				
ΔR_6	0,833 (2,601)	-0,397	0,452	-0,405	0,833	7,155 (22,337)			
Δr_2	0,227 (0,652)	0,181	0,015	-0,026	-0,023	0,014	5,106 (13,459)		
Δr_3	0,016 (0,046)	0,162	0,175	0,013	-0,020	-0,021	0,0	5,201 (13,709)	
Δr_4	-0,018 (-0,052)	0,012	0,175	0,175	0,012	-0,018	0,003	0,0	5,265 (13,879)
Δr_5	-0,021 (-0,060)	-0,020	0,013	0,175	0,162	0,016	0,001	0,002	0,0
Δr_6	0,014 (0,040)	-0,023	-0,026	0,015	0,181	0,227	0,002	0,001	0,003
β_2	-0,183 (-0,360)	0,161	0,009	0,002	0,012	-0,006	-0,011	-0,006	0,006
β_3	-0,018 (-0,035)	-0,159	0,165	0,007	-0,011	0,008	0,008	-0,001	-0,009
β_4	0,005 (0,009)	-0,008	-0,161	0,161	0,008	-0,005	-0,005	0,009	0,0
β_5	-0,008 (-0,017)	0,011	-0,007	-0,165	0,159	0,018	0,0	-0,005	0,009
β_6	0,006 (0,012)	-0,012	-0,002	-0,009	-0,161	0,183	0,005	0,0	-0,006
\bar{a}_1	0,039 (0,064)	-0,017	-0,010	-0,010	-0,017	0,039	0,150	-0,141	0,141
\bar{a}_2	0,151 (0,251)	-0,101	0,067	0,067	-0,101	0,151	0,078	0,079	-0,153
\bar{a}_3	0,183 (0,304)	-0,018	-0,148	0,148	0,018	-0,183	-0,154	0,131	0,0

(...) Közvetlenül számított, nem illesztett CNDO-értékek. A mértékegységek aJ-ban mért energiával $\text{\AA} = 10^2$ pm-ben mért nyújtási és rad-ban mért hajlítási koordinátával konzisztensek.

Az illesztett F -mátrixot a 6. táblázat tartalmazza. A CNDO/2 számításból közvetlenül adódó értékeket (csak az első oszlopra és a diagonális elemekre) zárójelben tüntettük fel. A sorok a 3. táblázatban megadott koordinátasorrendhez kapcsolódnak.

A piridin általunk számított erőállandói igen megbízhatóknak tűnnek, ha összehasonlítjuk a benzol empirikus normálkoordináta-analízissel kapott (Duinker és Mills [165], Whiffen [166]), vagy a Fogarasi és Pulay által [33] CNDO/2 módszerrel számított erőállandóival.

TÁBLÁZAT
erőállandói*

Jelölés	Δr_5	Δr_6	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	$\bar{\alpha}_1$	$\bar{\alpha}_2$	$\bar{\alpha}_3$
	5,201 (13,709)									
	0,0	5,106 (13,459)								
	0,0	-0,005	0,580 (0,714)							
	0,005	0,0	0,003	0,516 (0,635)						
	-0,009	0,005	-0,009	0,008	0,525 (0,646)					
	0,001	-0,008	-0,001	-0,009	0,008	0,516 (0,635)				
	0,006	0,011	-0,011	-0,001	-0,009	0,003	0,580 (0,714)			
	-0,141	0,150	-0,028	0,0	0,0	0,0	0,028	1,242 (1,088)		
	0,079	0,078	-0,081	0,068	0,0	-0,068	0,081	0,013	1,212 (1,062)	
	-0,131	0,154	0,0	-0,039	0,071	-0,039	0,0	0,0	0,0	1,497 (1,312)

Ugyanakkor azonban a *Long, Murfin és Thomas (LMT)* [164] által, *Whiffen* [166] benzol-erőtere alapján piridinre készített normálkoordináta-analízise eredményei jelentősen eltérnek a mi eredményeinktől.

Ennek magyarázata azzal kapcsolatos, hogy LMT [164] több elhanyagolást alkalmazott. Többek között a CC és a CN kötést azonosnak tekintette, s így a megfelelő erőállandók sem különböztek. Minthogy azonban a CN kötés legalább mintegy 5 pm-el rövidebb a CC kötésnél, a kapcsolódó nyújtási erőállandó ν CN-re nagyobb kell legyen, mint a ν CC-re. Ez a különbség a jelen dolgozatban közölt számítási eredményekben már tükröződik (6. táblázat): a CN nyújtási erőállandó értéke 7,155 Ncm⁻¹, míg a szomszédos CC-é 6,155 Ncm⁻¹.

Az LMT [164] által számított többi diagonális erőállandó a 6. táblázattal jól egyezik, a kölcsönhatási erőállandók azonban jelentősen különböznek. Egyrészt [164]-ben jó néhány kölcsönhatási erőállandó értéke az alkalmazott egyszerűsítések miatt zérus, másrészt sok esetben az erőállandók előjele is hibás. A meta kölcsönhatási tagok például valójában negatív előjelűek (l. pl. Scherer és Overend benzol-számításainak eredményét [167]), az F_{13} általunk számított értéke is negatív (6. táblázat) — LMT szerint ez pozitív lenne.

A piridinre végzett jelen erőtérszámítás megmutatta azt, hogy a nitrogén hatása összetettebb, mint azt korábban hitték. A benzol erőállandói az LMT-féle egyszerűsítések figyelembevételével nem alkalmazhatók közvetlenül a piridinre.

IV.1.2. A piridin és deuterált származékainak infravörös színeke.

A rezgések besorolása

Az erőállandók ismerete elsősorban a rezgési színek elméleti számításához fontos. Az illesztett CNDO/2-erőállandók és a dipólus-momentumderiváltak a 7., 8. és 9. táblázatban feltüntetett frekvencia-, illetve intenzitásértékeket eredményezik. A számított és mért frekvenciákat a 7. ábrán hasonlítottuk össze, a 8. ábra a számított intenzitásokat mutatja.

7. TÁBLÁZAT

A piridin kísérleti és számított alaprezgései (cm^{-1})

A szimmetria típusa	Jelölés [169]	Kísérleti frekv. [169]	A [33] skálafaktoraival szám. frekvenciák	Jelen számítás	A rezgés típusa CNDO/2 erőmódszer alapján
A_1	ν_1	992	1028	993	$\alpha(\text{CCC})$, ($\nu(\text{CN})$, $\nu(\text{CC})$)
	ν_2	3054	3080	3067	$\nu(\text{CH})$
	ν_{6a}	605	609	588	$\alpha(\text{CCC})$, (resp. $\alpha(\text{NCC})$)
	ν_{8a}	1583	1729	1637	$\nu(\text{CC})$
	ν_{9a}	1218	1224	1203	$\beta(\text{CH})$
	ν_{12}	1029	1067	1004	$\alpha(\text{CCC})$, (resp. $\alpha(\text{NCC})$)
	ν_{13}	3054	3096	3092	$\nu(\text{CH})$
	ν_{18a}	1068	1103	1055	$\beta(\text{CH})$, $\nu(\text{CN})$
	ν_{19a}	1482	1530	1499	$\beta(\text{CH})$, $\nu(\text{CN})$
	ν_{20a}	3036	3071	3037	$\nu(\text{CH})$
	ν_3	1235 ^x (1217)	1322	1236	$\nu(\text{CC})$, $\beta(\text{CH})$
	ν_{6b}	652	691	669	$\alpha(\text{CCC})$
	ν_{7b}	3036 ^y (3054)	3075	3038	$\nu(\text{CH})$
	ν_{8b}	1572	1689	1599	$\nu(\text{CN})$, $\nu(\text{CC})$
B_1	ν_{14}	1375	1353	1356	$\nu(\text{CN})$, $\beta(\text{CH})$
	ν_{15}	1148	1171	1157	$\beta(\text{CH})$
	ν_{18b}	1057 ^x (1068)	1098	1044	$\beta(\text{CH})$
	ν_{19b}	1439	1456	1428	$\beta(\text{CH})$
	ν_{20b}	3083	3092	3072	$\nu(\text{CH})$

(...) zárójelben az eredeti besorolás.

^x [174] által módosított érték.

^y [171] által módosított érték.

8. TÁBLÁZAT

A C_{2v} szimmetriájú deuterált piridinszármazékok kísérleti és számított frekvenciái (cm⁻¹)

A szimmetria típusa	Jelölés [169]	4-d ₁		2,6-d ₂		3,5-d ₂		d ₅		A rezgés típusa a CNDO/2 erőműdszer alapján
		mért [170]	szám.	mért [171]	szám.	mért [171]	szám.	mért [169]	szám.	
A ₁	ν ₁	989	978	986	971	967	972	962	958	α(CCC), (ν(CN), (CC))
	ν ₂	3045 ^y (3033)	3071	3065	3092	2297	2262	2293	2284	ν(CH)
	ν _{6a}	597	582	578	582	596	582	582	570	α(CCC), (resp. α(NCC))
	ν _{8a}	1575	1635	1586	1602	1577	1630	1530	1585	ν(CC)
	ν _{9a}	1215	1203	889	874	1179	1147	887	880	β(CH)
	ν ₁₂	1010 ^y (1015)	1003	1019	1005	1029	996	1006	981	α(CCC), (resp. α(NCC))
	ν ₁₃	2287	2276	2260	2239	3047	3088	2270	2259	ν(CH)
	ν _{18a}	1068	1053	1087	1096	828	831	823	824	β(CH), ν(CN)
	ν _{19a}	1476	1492	1457	1444	1436	1434	1340	1353	β(CH), ν(CN)
	ν _{20a}	3012	3037	3002	3066	3000	3039	2254	2234	ν(CH)
B ₁	ν ₃	1215	1217	1184	1174	1227 ^z (947)	1208	1043 ^w (908)	1041	ν(CC), β(CH)
	ν _{6b}	648	666	635	659	642	658	625	645	α(CCC)
	ν _{7b}	3035	3038	2252	2238	3049	3039	2285	2236	ν(CH)
	ν _{8b}	1559	1585	1568	1583	1589	1585	1542	1553	ν(CN), ν(CC)
	ν ₁₄	1347	1340	1243 ^z (1345)	1237	1328	1347	1301 ^w (1322)	1263	ν(CN), β(CH)
	ν ₁₅	1086	1090	1128	1124	897 ^z (1105)	881	833 ^x (887)	847	β(CH)
	ν _{18b}	862	864	915 ^z (860)	909	1081	1066	833	831	β(CH)
	ν _{19b}	1413	1383	1415	1423	1411	1378	1228 ^w (1301)	1215	β(CH)
	ν _{20b}	3069	3072	3067	3071	2281	2265	2293	2267	ν(CH)

(...) zárójelben az eredeti besorolás.

^x [174] által módosított érték; ^y [171] által módosított érték; ^w [173] által módosított érték; ^z a jelen dolgozatban javasolt módosítás.

9. TÁBLÁZAT
Számított intenzitások (cm mmol^{-1})

A szimmetria típusa	Jelölés [169]	Piridin				
		d_0	$4-d_1$	$2,6-d_2$	$3,5-d_2$	d_3
A_1	ν_1	698	182	28	5	61
	ν_2	9603	511	6644	11 063	5616
	ν_{6a}	36	29	42	24	23
	ν_{8a}	4164	3874	4761	3 853	4247
	ν_{9a}	79	80	12	286	420
	ν_{12}	8	635	2	225	4
	ν_{13}	4691	3118	7276	604	2526
	ν_{18a}	451	396	395	395	74
	ν_{19a}	604	598	0	592	0
	ν_{20a}	7892	5211	2946	3 096	4929
	ν_3	20	57	463	252	4
B_1	ν_{6b}	98	109	84	103	99
	ν_{7b}	64	7892	56	4 181	1057
	ν_{8b}	1029	1500	980	1 192	1646
	ν_{14}	570	40	52	8	229
	ν_{15}	192	144	283	0	14
	ν_{18b}	35	35	300	325	443
	ν_{19b}	1924	1848	1527	2 303	1049
	ν_{20b}	6020	9597	6344	5 281	3043

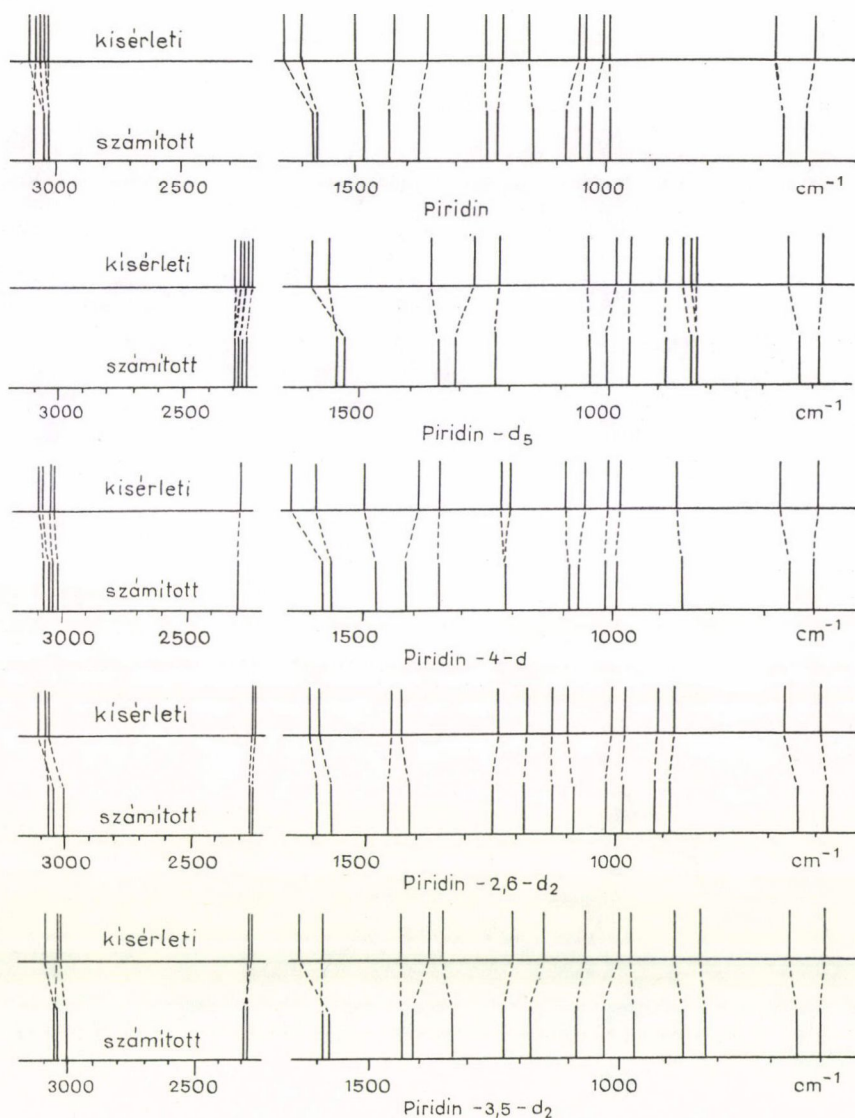
A piridin, illetve deuterált származékai rezgési frekvenciának besorolásával több dolgozat foglalkozik [168–174]. Piridinre végzett számításaink *Corrsin*, *Fax* és *Lord* (CFL) eredeti besorolását [169] általában alátámasztják. Mindössze három esetben szükségesek változtatások: számításainak szerint a ν_{7b} frekvencia (CH nyújtás) *Wilmshurst* és *Bernstein* (WB) [171] által javasolt 3036 cm^{-1} -es értéke a helyes, nem a CFL szerinti 3054 cm^{-1} , ugyanígy azt találtuk, hogy a ν_2 és ν_{18} frekvenciákra a *Suzuki* és *Orville-Thomas* [174] javasolta értékek a megfelelőek (vö. a 7. táblázattal).

A piridin $4-d_1$ esetében az alapsávok besorolását *Anderson* és *mtsai* [170] adták meg. Ezt WB [171] Raman-felvételek alapján két helyen (ν_2 és ν_{12}) módosította. Számításaink a két módosítást alátámasztották (8. táblázat).

A kétszeresen deuterált piridinszármazékok (piridin-2,6- d_2 és 3,5- d_2) alapbesorolása a [171] közleményben található (8. táblázat). Ehhez képest két-két változtatást javasol az irodalom.

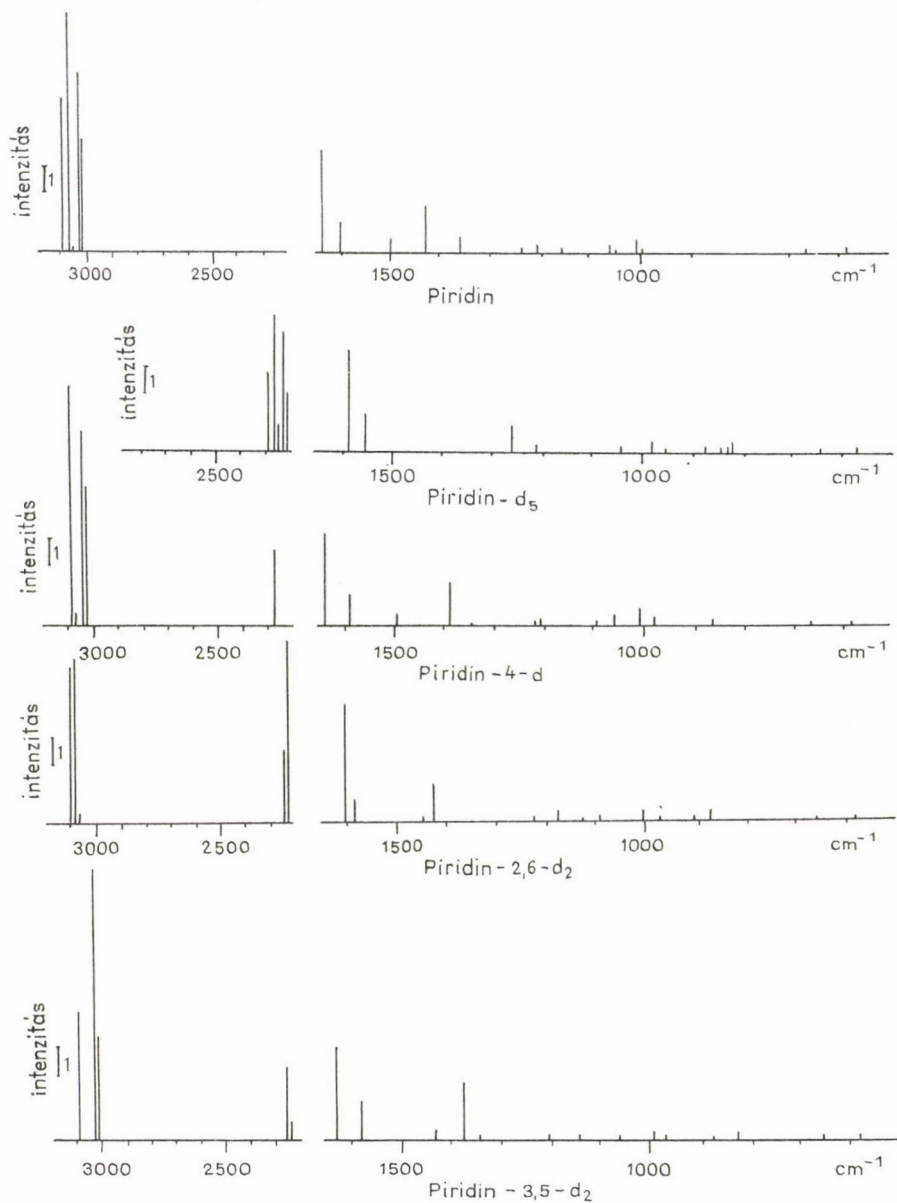
A 2,6- d_2 származék igen gyenge, 1345 cm^{-1} -nél megjelenő, de a gőzspektrumból hiányzó sávját ([171] szerint ν_{14} (B_1)) *Zerbi* és *mtsai* [173] szerint síkra merőleges deformációs sáv felharmonikusának kell tekinteni, s szerintük a ν_{14} (B_1) rezgésnek a 1258 cm^{-1} -es sáv felel meg. Szerintünk, a 8. és 9. táblázat alapján, ehelyett az 1243 cm^{-1} -es sáv, amely a Raman-spektrumban is jelentkezik, rendelhető a ν_{14} (B_1) normálrezgéshez.

Ugyanez a közlemény [173], a ν_{18b} (B_1) eredeti 860 cm^{-1} -es sávja helyett a $\sim 902 \text{ cm}^{-1}$ -nél megjelenő sávot ajánlja. Noha a 902 cm^{-1} közelíti meg az általunk számított 909 cm^{-1} -es értéket a legjobban, a sáv túlságosan bizonytalan, s véleményünk szerint helyesebb a 915 cm^{-1} -es sávot a ν_{18b} (B_1) rezgéshez rendelni. Ez ugyanis a folyadék- és gázhalmazállapotban felvett spektrumokban egyaránt megtalálható.



7. ábra. A piridin és C_{2v} deuterált származékai számított és mért frekvenciáinak összehasonlítása. Az összetartozó értékeket szaggatott vonal jelzi

A piridin-3,5- d_2 -re kapott számítási eredmények ugyan alátámasztják Zerbi javaslatát [173], miszerint a ν_3 (B_1) rezgés besorolása módosítandó, s a 947 cm^{-1} -es sáv síkra merőleges (out-of-plane) deformációnak tulajdonítható (l. [172]-t is), de nem támasztják alá az általa javasolt másik asszignációt: a 897 cm^{-1} -es sáv ν_3 (B_1)-hez való rendelését. Amint az a 8. táblázatból kitűnik, ν_3 (B_1)-nek a 1227 cm^{-1} -es



8. ábra. A piridin és C_{3v} szimmetriájú deuterált származékai számított színeképe.
A vonalak hossza a számított intenzitással arányos.

sáv ajánlható, míg a 897 cm^{-1} -es sáv ν_{15} (B_1)-nek felel meg. Az 1105 cm^{-1} -es sáv (amelyet korábban [171], ν_{15} -nek asszignáltak) két síkra merőleges rezgési kombinációja: $\nu_4 + \nu_{16b} = 391 + 713 = 1104\text{ cm}^{-1}$.

Valójában a 897 cm^{-1} -es sáv ν_{15} -höz rendelése nem magától értetődő. A 881 cm^{-1} -es számított érték ugyanis nem teszi lehetővé a választást a 867 cm^{-1} -es sáv (WB [171] szerint A_2) és a 897 cm^{-1} -es sáv (WB [171] szerint B_2) között. Ha a 947 cm^{-1} -es sáv A_2 szimmetriájú rezgéshez kapcsolódna — mint azt Kovner és mtsai [172] javasolják —, úgy a 867 cm^{-1} -es sávot kellene ν_{15} -nek tekinteni. A C_{2v} pontcsoport A_2 alaprezgése azonban csak a Raman-színképben jelenhet meg, az infravörösben nem: ez pedig nem áll a 947 cm^{-1} -es sávra (amelynek nincs Raman-aktivitása). Következésképp a 867 cm^{-1} -es sáv lesz A_2 szimmetriájú, a 947 cm^{-1} -es pedig B_2 , így a 897 cm^{-1} -es sáv felel meg ν_{15} -nek.

Végezetül, a teljesen deuterált piridinszármazék (piridin- d_5) esetében a számítási eredményeink az eredeti CFL-besorolás [169] Zerbi [171] által a ν_3 (B_1), ν_{14} (B_1) és ν_{19b} (B_1) rezgésekre és Suzuki és Orville-Thomas [174] által a ν_{15} (B_1) rezgésre javasolt módosításait támasztották alá (8. táblázat).

A 95 frekvenciára számított négyzetes eltérés 18 cm^{-1} , amely azt mutatja, hogy mindössze 5 paraméter felhasználásával a kísérlettel igen jól egyező eredmények számíthatók.

IV.2. Az uracil egyensúlyi geometriájának, erőterének és rezgési színképének meghatározása

IV.2.1. Előzetes megjegyzések

E munka megkezdésekor (1979-ben) a gőzállapotú uracil rezgési színképe nem volt ismeretes: az irodalomban csak szilárd fázisban, illetve oldatokban végzett mérések eredményeit közölték (II. 2. fejezet).

Ezáltal a kvantumkémiai számítással nyert elméleti színkép kísérletileg nem ellenőrizhető információ: minél pontosabb színképszámításra volt szükség.

Ugyanakkor ismeretes (I.5. fejezet, illetve IV.1. fejezet), hogy a CNDO/2 erőmódszerrel végzett számítás az erőállandók szisztematikus hibákkal terhelt (általában a valóságosnál nagyobb) értékeit szolgáltatja, amelyek a helyes frekvenciaértékeknél általában nagyobb frekvenciákat eredményeznének. A számított erőállandó-értékek azonban megfelelő skálafaktorral szorozva reálisak lehetnek (I.5. fejezet), amit az mutat, hogy segítségükkel a kísérleti színkép kellő pontossággal reprodukálható (IV.1. fejezet).

A skálafaktorok, a kísérleti színképre történő illesztéshez használt empirikus paraméterek, jelen esetben — a kísérleti színkép hiányában — nem határozhatók meg: az erőállandók korrekcióját hasonló szerkezetű molekulákra kiszámított skálafaktorokkal kell elvégezni.

Várható, hogy megfelelő modellvegyületek skálafaktorai segítségével az uracil skálafaktorai is jól közelíthetők.

Első modellünk a piridin és a formamid volt. E két vegyület skálafaktorai ismeretek [39], illetve [175—178], alkalmazásuk azonban nem hozta meg a kívánt eredményt: a számított színkép irreális mértékben különbözött a szilárd fázisú kísérleti színképtől. Ennek oka az, hogy az uracil szerkezete — bár az uracil neve szerint szín-

tén pirimidin bázis — jelentősen különbözik a konjugált szerkezetű pirimidintól (l. [190]), s ezáltal a szintén konjugált piridintól is: az uracilban levő kettőskötés lokalizálható, az uracilgyűrű nem konjugált (vö. az egyensúlyi geometriával foglalkozó IV.2.2. fejezettel).

Sokkal jobb referencia-molekulának bizonyult az uracilhoz igen hasonló felépítésű maleinimid, amely azonos módon váltakozó ugyanolyan kötéseket tartalmaz. A két vegyületnek csak a gyűrűtagszáma különbözik egymástól: a maleinimid gyűrűjét egy NH csoporttal bővítve az uracil nyerhető (IV.2.2. fejezet).

A továbbiakban, sűrű előfordulásuk miatt az uracilt U-val, a maleinimidet MIM-mel jelöljük.

Természetesen ahhoz, hogy a MIM-et referencia-molekulaként felhasználhassuk, nem elegendő a szerkezeti hasonlóság, mindenekelőtt a gázfázisban felvett infravörös színekpre van szükség, amely alapján a CNDO/2 módszerrel számított és kísérleti színek összehasonlítható, s megbízható skálafaktorok nyerhetők.

A MIM rezgési színeképét *Woldbaek és mtsai* [179] írták le a legrészletesebben: alapos munkájukban a gázfázisú felvétel (433 K) mellett olvadáskor (373 K), valamint különböző oldatainak (oldószer: CCl_4/CS_2 , $\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$, C_6H_6) és szilárd orientált polikristályos vékonyrétegének infravörös- és Raman-színeképeit is közlik, nemcsak a MIM-ről, hanem N-deuterált származékáról is. A sávok besorolását normálkoordináta-analízissel is alátámasztották: megjegyzendő, hogy a kísérleti besorolás a MIM nagyobb szimmetriája miatt (C_{2v}) eleve megbízhatóbb, mint az U esetében lenne (C_s).

Az elmondottak alapján a MIM igen jó referencia-molekulának ígérkezett, ezért kiszámítottuk erőterét, majd elméleti rezgési színeképét, s meghatároztuk (az I.5.2. fejezetben leírt módon) a skálafaktorokat.

Az uracil elméleti rezgési színeképének számítása során a maleinimidre kapott skálafaktorokkal korrigáltuk az uracil számított erőterét, majd a Wilson-féle GF-módszerrel számítottuk ki — a célkitűzésnek megfelelően — az uracil-gőz rezgési színeképét.

Az elméleti színekép elkészülte után kooperációs partnerünk (a Római Egyetem Fizikai Kémiai Tanszéke) egyik munkatársának, *S. Nunziante-Cesaro*-nak sikerült néhány kísérleti felvételt is készítenie. Rendelkezésünkre bocsátotta az uracil Ar-mát-rixban felvett színeképét [180], valamint az uracil hangolható dióda lézerrel [181] és gázküvetében hagyományos gerjesztő forrással készült [182] gázfázisú színeképét. A színeképek alapján lehetőség nyílt

1. az alkalmazott gondolatmenet, illetve a számítások pontosságának ellenőrzésére, valamint a skálafaktorok pontosítására,
2. a kísérleti színekép besorolására,
3. a skálafaktorok átvihetőségére vonatkozó következtetések levonására.

A számításokat részletesen bemutatjuk. Az uracil elméleti színeképének a MIM modellvegyület kísérleti színeképe alapján történő számításának részleteire azért térünk ki, mert úgy véljük, hogy ez az elv (*adott, kísérleti színeképpel nem rendelkező vegyület elméleti színeképének számítása félempirikus kvantumkémiai módszerrel, felhasználva egy másik, kémiailag hasonló modellvegyület kísérleti és ugyanilyen módon számított elméleti színeképének összehasonlításából származó korrekciós faktorokat*) jól alkalmazható egyéb, olyan vegyületek — pl. metabolitok, iparilag fontos intermedierek, végtermékek — színeképének meghatározására, amelyek rezgési színeképe nem vagy csak nehezen határozható meg. Az uracil az általános elv szemléltetésére különösen

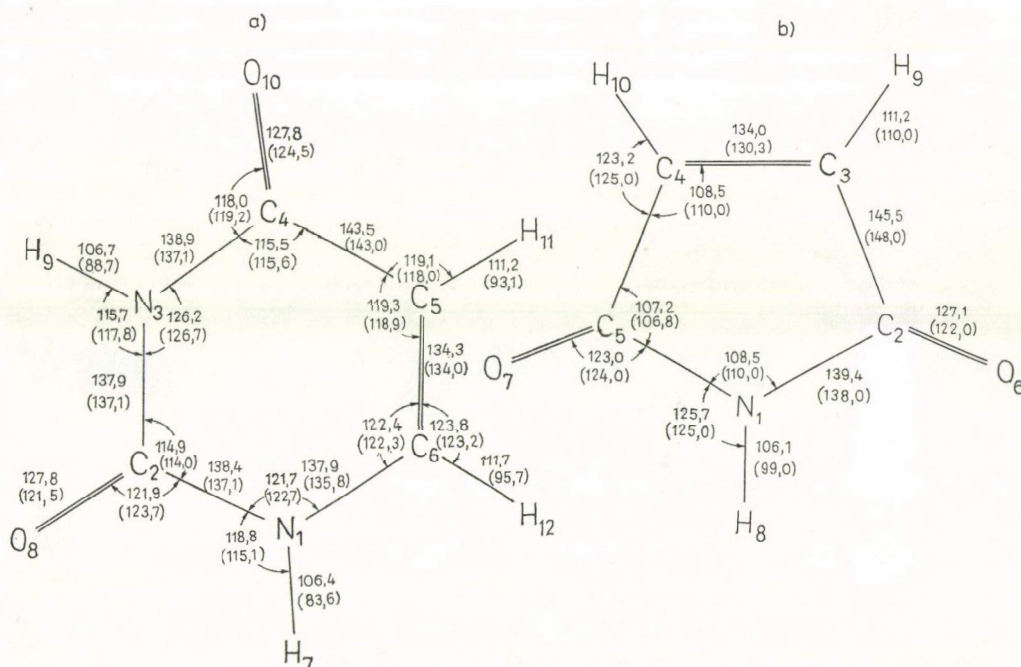
alkalmas, mert esetében a jóslott (azaz a hasonló szerkezetű molekula korrekciós faktorait felhasználó félempirikus módszerrel nyert) színkép és a számított színkép összehasonlításával mód van a jóslott színkép megbízhatóságának kvantitatív jellemzésére.

IV.2.2. A maleinimid (MIM) és az uracil (U) egyensúlyi geometriájának számítása

Az irodalomban csupán a szilárd fázisban, röntgendiffrakciós szerkezetmeghatározó módszerekkel kapott geometriai paramétereket közlik (MIM: [183], U: [84]). A szabad molekulák egyensúlyi geometriáját számítással határoztuk meg.

Az U négyféle tautomerje közül (egy dienol, két enol-keto és egy diketo alak) szilárd fázisban a diketo tautomer fordul elő, amit UV és IR spektroszkópiával mutattak ki [184]. Kvantumkémiai módszerek segítségével a gázfázisban is sikerült a keto alak nagyobb relatív stabilitását kimutatni [185, 186]: *Fujita és mtsai* szerint pl. a CNDO/2 módszerrel végzett számítások alapján az U diketo tautomerje a dienolnál 43,42 kJ mol⁻¹-el stabilabb [186]. Ezek alapján mindkét molekulának csak a diketo tautomerjében számítottuk ki az egyensúlyi magkoordinátákat.

Az egyensúlyi geometriákat a CNDO/2 erőmódszer Nalewajski-féle algoritmus-sal [26, 27] módosított változatával számítottuk ki (I.4.2.2. fejezet).



9 ábra. Az uracil (a) és a maleinimid (b) számított és kísérleti (zárójelben) egyensúlyi geometriája. A kísérleti értékeket a röntgendiffrakciós mérések alapján számították ((a): [84], (b): [183]).

Az U és a MIM számított geometriája a 9. ábrán látható. Zárójelben a röntgen-diffrakciós módszerrel nyert kísérleti értékek. A számítások eredménye jól mutatja a MIM és az U kötésviszonyainak hasonlóságát.

Ha a 9. ábrán számított geometriai paramétereket a zárójelben levő kísérleti értékekkel vetjük össze, figyelembe kell venni mindkét módszer pontatlanságát is. A CNDO-értékek a legpontosabb kísérleti (mikrohullámú vagy elektrondiffrakciós) egyensúlyi adatoktól kettőskötések esetén ± 2 pm-el, egyeskötések esetén ± 3 – 5 pm-el is eltérhetnek [38], s ez az eltérés növekedhet, ha a kísérleti szerkezet röntgen-diffrakciós mérésekből származik. Mindazonáltal, a gyűrű számított és mért kötéshosszai jól egyeznek, csak a gyűrűn kívüli kötéshosszak (NH, CH, CO) különböznek számottevően. Ami a 9. ábra kísérleti és számított kötésszögeit illeti, a két módszer különbözősége és megbízhatósága miatt a $1,5^\circ$ -nál kisebb különbségekkel nem foglalkozunk. A mért és számított szögek elsősorban a gyűrű külső szögei esetében térnek el. Noha a kísérleti és számítási módszer megbízhatósága kicsiny különbségek értelmezését nem teszi lehetővé, az megállapítható, hogy a mért és számított adatok különbségének legfőbb oka az lehet, hogy a szilárd fázisban levő és a szabad molekulák szerkezete (a hidrogénkötések stb. miatt) különbözik egymástól.

A geometria-számítás eredményeinek részletes diszkussziója a [187] dolgozatban található.

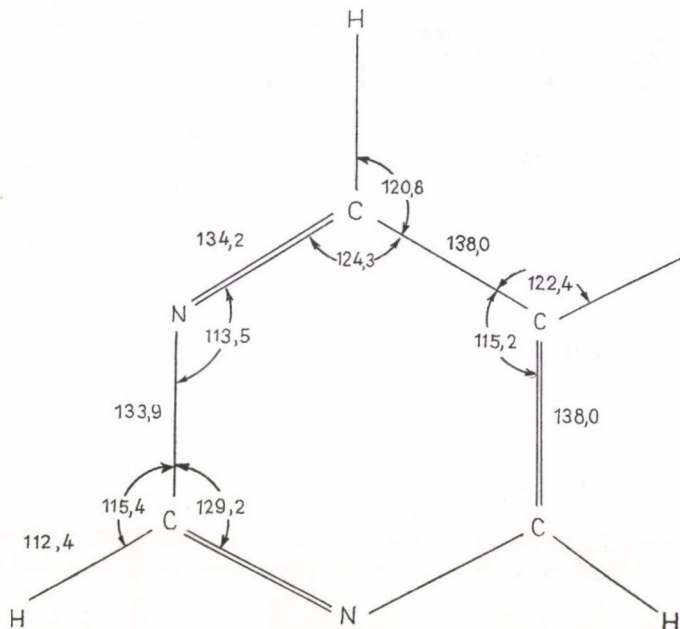
Azt, hogy az U szilárd fázisú geometriája a gázfázisútól jelentősen különbözik, Zielinski és Rein munkája [188] közvetetten is alátámaszthatja, akik a MINDO/2 módszerrel végzett számításait oly módon optimalizálják, hogy a kísérleti, kristallográfiai kötéshosszakkal kapjanak igen jó egyezést. Ezen geometriai adatok figyelembevételével a MINDO/2 módszerrel számítva a tautomerizációs energiákat a tapasztalattal ellentétes eredményre jutnak: az enol-keto tautomer stabilitását a diketoénál nagyobbak találják. A kísérletnek ellentmondó eredmény egyik oka az lehet, hogy az U geometriája a szilárd és a gázfázisban nem egyezik meg; az izolált molekulákra vonatkozó számítások során a kondenzált fázis geometriája nem vehető figyelembe.*

A számított geometriai paraméterek más fázisra vonatkozó kísérleti értékekkel, illetve más módon számított eredményekkel történő összevetése helyett célszerűbb és realisabb, ha az adott módszerrel kapott molekulaparamétereket ugyanazzal a módszerrel más molekulákra számított molekulaparaméterrel vetjük össze. Az azonos módszer miatt a megfelelő kötésszögek, illetve kötéshosszak a különböző molekulákban feltehetően azonos relatív pontossággal számíthatók és így a paraméterek koherens rendszerében kvalitatív szerkezeti-kémiai következtetések is levonhatók.

Az U és a MIM-ben levő C—C, C=C és C=O kötések hosszait az etánra, az etilénre és a formamidra kapott CNDO/2 értékekkel vethetjük össze. Az etán C—C kötésének számított értéke 146 pm [24], gyakorlatilag alig különbözik az U-ban levő C—C kötés hosszától: 143,5 pm (9. ábra). Az etilén számított C=C kötéshossza 131 pm [24], a formamid C=O kötéséé 126,8 pm [178]. Ezek szintén nem sokban különböznek a 9. ábra megfelelő kötéseitől (C=C: 134,3 pm; C=O: 127,7 pm). Az U-ban levő valamivel hosszabb C=C, illetve C=O kötés, valamint a rövidebb C—C és C—N kötés igen mérsékelt delokalizációra mutat; ezt támasztja alá a megfelelő csatolási erőállandók kis értéke is.

*A kísérlettel ellentétes eredmény származhat a felhasznált közelítő módszer pontatlanságából is: a MINDO/2 módszer egyéb molekulákra sem mindig szolgáltat kielégítő eredményeket [189], de a hibák nem tautomerizációs problémákkal kapcsolatosak.

Az uracil CNDO/2 módszerrel számított geometriáját a pirimidin ugyanúgy számított geometriájához hasonlítva, az uracil-gyűrűről is levonhatók következtetések. A pirimidin szerkezetét Török és mtsai [190] számították ki, a molekulageometriát a 10. ábra mutatja.



10. ábra. A pirimidin CNDO/2 módszerrel számított egyensúlyi geometriája [190]

A 9. ábrával összevetve kitűnik a különbség: a pirimidin benzolszerűen konjugált C—C kötéseivel (138 pm) szemben az U-ban és a MIM-ben lokalizált kettőskötések (134 pm) találhatók. Ugyanígy eltérőek a gyűrűk C—N kötéstávolságai is: az U-ban és a MIM-ben értékük 138—139 pm (egyeskötések), míg a pirimidinben rövidebbek (134 pm), konjugáltak.

Az uracil szerkezetét tekintve minőségileg különbözik a pirimidintől; az uracil szerkezetével a maleinimidé mutat hasonlóságot.

A számított geometriák összehasonlítását hasonló molekulák sorozatán belül elvégezve, a szerkezeti paraméterek változásáról s így a kémiai viselkedés módosulásáról kaphattunk képet. Ilyen sorozatszámítást a metil (Me)-szubsztituált uracilokra (1-Me, 2-Me, 5-Me (timin), 6-Me, 1,3-diMe, 5,6-diMe), valamint az azauracilokra (5-aza és 6-aza) végeztünk.

A CNDO/2 módszerrel számított geometriákat a függelék F.1—F.8. ábrái mutatják, a fontosabb geometriai paramétereket az F.1. és F.2. táblázatban adjuk meg. E táblázatokból jól kitűnik a különböző szubsztituensek (elsősorban lokális) geometria-módosító hatása, s kémiai következtetések levonására is lehetőség nyílik. E táblázatok részletes értelmezésére másutt térünk ki [187].

10. TÁBLÁZAT
Az uracil belső koordinátái

A belső koordináták sorszáma	Típusa	A koordináták definíciója*	A koordináta jelentése
1.	nyújtás (ΔR_1^U)	$\nu(C_5=C_6)$	C=C kötéshossz-nyúlás
2.	nyújtás (ΔR_2^U)	$\nu(C_4-C_5)$	C—C kötéshossz-nyúlás
3.	nyújtás (ΔR_3^U)	$\nu(C_4-N_3)$	C—N kötéshossz-nyúlás
4.	nyújtás (ΔR_4^U)	$\nu(N_3-C_2)$	C—N kötéshossz-nyúlás
5.	nyújtás (ΔR_5^U)	$\nu(N_1-C_2)$	C—N kötéshossz-nyúlás
6.	nyújtás (ΔR_6^U)	$\nu(N_1-C_6)$	C—N kötéshossz-nyúlás
7.	nyújtás (Δr_1^U)	$\nu(C_6-H)$	C—H kötéshossz-nyúlás
8.	nyújtás (Δr_2^U)	$\nu(C_5-H)$	C—H kötéshossz-nyúlás
9.	nyújtás (Δr_3^U)	$\nu(C_4=O)$	C=O kötéshossz-nyúlás
10.	nyújtás (Δr_4^U)	$\nu(N_3-H)$	N—H kötéshossz-nyúlás
11.	nyújtás (Δr_5^U)	$\nu(C_2=O)$	C=O kötéshossz-nyúlás
12.	nyújtás (Δr_6^U)	$\nu(N_1-H)$	N—H kötéshossz-nyúlás
13.	hajlítás ($\bar{\alpha}_1^U$)	$\alpha(N_1-C_6=C_5) -$ $- \alpha(C_6=C_5-C_4) +$ $+ \alpha(C_5-C_4-N_3) -$ $- \alpha(C_4-N_3-C_2) +$ $+ \alpha(N_3-C_2-N_1) -$ $- \alpha(C_2-N_1-C_6)$	gyűrűdeformáció (síkban)
14.	hajlítás ($\bar{\alpha}_2^U$)	$2\alpha(N_1-C_6=C_5) -$ $- \alpha(C_6=C_5-C_4) -$ $- \alpha(C_5-C_4-N_3) +$ $+ 2\alpha(C_4-N_3-C_2) -$ $- \alpha(N_3-C_2-N_1) -$ $- \alpha(C_2-N_1-C_6)$	gyűrűdeformáció (síkban)
15.	hajlítás ($\bar{\alpha}_3^U$)	$\alpha(C_6=C_5-C_4) -$ $- \alpha(C_5-C_4-N_3) +$ $+ \alpha(N_3-C_2-N_1) -$ $- \alpha(C_2-N_1-C_6)$	gyűrűdeformáció (síkban)
16.	hajlítás (β_1^U)	$\beta(H-C_6=C_5) -$ $- \beta(H-C_6-N_1)$	CCH kötésszög-deformáció
17.	hajlítás (β_2^U)	$\beta(H-C_5-C_4) -$ $- \beta(H-C_5=C_6)$	CCH kötésszög-deformáció
18.	hajlítás (β_3^U)	$\beta(O=C_4-N_3) -$ $- \beta(O=C_4-C_5)$	CCO kötésszög-deformáció
19.	hajlítás (β_4^U)	$\beta(H-N_3-C_2) -$ $- \beta(H-H_3-C_4)$	CNH kötésszög-deformáció
20.	hajlítás (β_5^U)	$\beta(O=C_2-N_1) -$ $- \beta(O=C_2-N_3)$	NCO kötésszög-deformáció
21.	hajlítás (β_6^U)	$\beta(H-N_1-C_6) - \beta(H-N_1-C_2)$	CNH kötésszög-deformáció
22.	torzió (τ_1^U)	$\tau(C_6-N_1-C_2-N_3) -$ $- \tau(C_5=C_6-N_1-C_2) +$ $+ \tau(C_4-C_5=C_6-N_1) -$ $- \tau(N_3-C_4-C_5=C_6) +$ $+ \tau(C_2-N_3-C_4-C_5) -$ $- \tau(N_1-C_2-N_3-C_4)$	gyűrűtorzió
23.	torzió (τ_2^U)	$\tau(C_6-N_1-C_2-N_3) -$ $- \tau(C_4-C_5=C_6-N_1) +$ $+ \tau(N_3-C_4-C_5=C_6) -$ $- \tau(N_1-C_2-N_3-C_4)$	gyűrűtorzió

10. táblázat folytatása

A belső koordináták sorszáma	Tipusa	A koordináták definíciója	A koordináták jelentése
24.	torzió (τ_3^U)	$2\tau(C_5=C_6-N_1-C_2) -$ $-\tau(C_4-C_5=C_6-N_1) -$ $-\tau(N_3-C_4-C_5=C_6) +$ $+2\tau(C_2-N_3-C_4-C_5) -$ $-\tau(N_1-C_2-N_3-C_4) -$ $-\tau(C_6-N_1-C_2-N_3)$	gyűrűtorzió
25.	síkra merőleges deformáció (γ_1^U)	$\gamma(H-C_6=C_5-N_1)$	H kimozdul az $N_1C_6C_5$ síkból
26.	síkra merőleges deformáció (γ_2^U)	$\gamma(H-C_5-C_4-C_6)$	H kimozdul a $C_6C_5C_4$ síkból
27.	síkra merőleges deformáció (γ_3^U)	$\gamma(O=C_4-C_5-N_3)$	O kimozdul a $C_5C_4N_3$ síkból
28.	síkra merőleges deformáció (γ_4^U)	$\gamma(H-N_3-C_4-C_2)$	H kimozdul a $C_4N_3C_2$ síkból
29.	síkra merőleges deformáció (γ_5^U)	$\gamma(O=C_2-N_1-N_3)$	O kimozdul az $N_3C_2N_1$ síkból
30.	síkra merőleges deformáció (γ_6^U)	$\gamma(H-N_1-C_2-C_6)$	H kimozdul a $C_2N_1C_6$ síkból

* Az atommagok számozása megegyezik a 9. ábrán megadottakkal, a koordinátatípus jelölése a piridinnél alkalmazottal (6. ábra), az U felső index az uracilt jelenti.

IV.2.3. Az uracil korrigálatlan CNDO-erőtere

Az U rezgési szabadsági fokainak száma 30, a planáris, C_s szimmetriájú molekula 21 A' specieszbe tartozó normálrezgése síkrezgés, míg 9 síkra merőleges normálrezgése az A'' specieszbe tartozik. Valamennyi rezgése megjelenik az infravörös, illetve a Raman-színeképben is.

Az erőállandók számításához [32] alapján 21 síkbeli és 9 síkra merőleges nem-redundáns belső koordinátát definiáltunk. A belső koordinátákat a 10. táblázat mutatja.

Az U erőterét az I.5.1. fejezetben ismertetett módon számítottuk ki: a belső koordináták mentén egyenként kitérítve a molekulát a 9. ábrán bemutatott egyensúlyi geometriájából, valamennyi kitérítésre meghatároztuk a torzult konfiguráció energiáját, illetve a belső erőket, s numerikus deriválással az erőállandókat.

Az U síkbeli (in-plane) erőállandói a 11. táblázatban, a síkra merőleges deformációk (out-of-plane) erőtere a 12. táblázatban található.

A táblázatban zárójelben szereplő, a CNDO-egyszerűsítések következtében túl nagy erőállandó-értékeket a MIM kísérleti és számított frekvenciáinak összehasonlításából származó skálafaktorokkal korrigáljuk.

	ΔR_1^U	ΔR_2^U	ΔR_3^U	ΔR_4^U	ΔR_5^U	ΔR_6^U	Δr_1^U	Δr_2^U	Δr_3^U	Δr_4^U
ΔR_1^U	8,459 (22,023)									
ΔR_2^U	0,492 (1,404)	5,168 (16,194)								
ΔR_3^U	-0,067 (-0,200)	0,336 (1,099)	5,609 (19,105)							
ΔR_4^U	0,104 (0,310)	-0,057 (-0,187)	0,329 (1,119)	5,780 (19,686)						
ΔR_5^U	-0,090 (-0,267)	0,073 (0,238)	-0,076 (-0,259)	0,388 (1,321)	5,694 (19,392)					
ΔR_6^U	0,683 (2,032)	-0,168 (-0,550)	0,107 (0,365)	-0,086 (-0,293)	0,341 (1,162)	5,810 (19,788)				
Δr_1^U	0,212 (0,512)	0,019 (0,050)	-0,023 (-0,065)	-0,019 (-0,053)	0,007 (0,018)	0,185 (0,512)	5,204 (11,691)			
Δr_2^U	0,199 (0,482)	0,140 (0,371)	0,012 (0,034)	-0,020 (-0,057)	-0,015 (-0,042)	0,002 (0,005)	-0,001 (-0,002)	5,341 (11,999)		
Δr_3^U	-0,145 (-0,388)	0,597 (1,749)	0,784 (2,393)	-0,028 (-0,086)	-0,018 (-0,054)	0,063 (0,192)	0,005 (0,013)	-0,003 (-0,005)	10,452 (28,611)	
Δr_4^U	-0,023 (-0,055)	0,013 (0,034)	0,186 (0,507)	0,179 (0,487)	0,006 (0,016)	-0,016 (-0,043)	-0,000 (-0,000)	0,001 (0,002)	-0,008 (-0,021)	6,590 (14,342)
Δr_5^U	-0,035 (-0,094)	-0,021 (-0,061)	-0,035 (-0,107)	0,751 (2,294)	0,749 (2,288)	-0,028 (-0,086)	0,008 (0,019)	0,002 (0,005)	0,032 (0,087)	-0,012 (-0,030)
Δr_6^U	0,001 (0,003)	-0,009 (-0,025)	-0,019 (-0,053)	0,008 (0,022)	0,167 (0,455)	0,185 (0,504)	-0,000 (0,000)	0,001 (-0,002)	-0,007 (-0,016)	-0,000 (-0,000)
$\bar{\alpha}_1^U$	0,078 (0,106)	-0,004 (-0,005)	-0,017 (-0,027)	-0,011 (-0,017)	-0,022 (-0,035)	0,057 (0,088)	-0,168 (-0,211)	0,154 (0,194)	-0,231 (-0,320)	0,155 (0,192)
$\bar{\alpha}_2^U$	0,059 (0,080)	-0,123 (-0,182)	0,076 (0,117)	0,088 (0,136)	-0,126 (-0,195)	0,122 (0,190)	-0,184 (-0,231)	0,085 (0,107)	0,130 (0,181)	-0,168 (-0,208)
$\bar{\alpha}_3^U$	0,142 (0,193)	0,066 (0,098)	-0,058 (-0,090)	0,050 (0,078)	-0,061 (-0,094)	-0,105 (-0,162)	0,017 (0,021)	-0,155 (-0,195)	0,264 (0,366)	-0,009 (-0,011)
β_1^U	0,138 (0,280)	0,014 (0,032)	0,014 (0,033)	0,004 (0,010)	-0,000 (-0,001)	-0,152 (-0,353)	-0,010 (-0,020)	-0,006 (-0,011)	0,001 (0,001)	-0,000 (-0,000)
β_2^U	-0,157 (-0,318)	0,117 (0,251)	0,015 (0,035)	-0,016 (-0,038)	0,017 (0,039)	-0,008 (-0,020)	0,010 (0,019)	-0,009 (0,017)	-0,006 (-0,013)	0,004 (0,008)
β_3^U	0,018 (0,028)	-0,225 (-0,395)	0,300 (0,549)	-0,021 (-0,039)	0,022 (0,040)	-0,064 (-0,117)	-0,009 (-0,014)	0,010 (0,015)	0,000 (0,000)	-0,006 (-0,009)
β_4^U	0,022 (0,033)	-0,016 (-0,027)	-0,120 (-0,205)	0,140 (0,239)	0,023 (0,039)	-0,027 (-0,047)	0,000 (0,000)	-0,006 (-0,008)	-0,018 (-0,027)	0,012 (0,016)
β_5^U	0,038 (0,061)	-0,029 (-0,051)	0,033 (0,060)	-0,270 (-0,494)	0,277 (0,506)	-0,046 (-0,084)	0,007 (0,011)	-0,001 (-0,002)	-0,017 (-0,023)	0,005 (0,007)
β_6^U	0,018 (0,026)	-0,020 (-0,032)	0,015 (0,025)	-0,021 (-0,035)	-0,122 (-0,209)	0,164 (0,280)	-0,007 (-0,009)	0,005 (0,007)	-0,003 (-0,004)	-0,004 (-0,005)

* A jelölés magyarázata a 10. táblázatban található. Mértékegység: vö. 6. táblázattal.

A zárójelben levő értékek direkt számítással nyert, korrigálatlan CNDO-erőállandók.

IV.2.4. Az uracil erőterének korrekciója

IV.2.4.1. A korrekcióhoz használt skálafaktorok meghatározása
a maleinimid kísérleti és számított rezgési színeképe alapján

IV.2.4.1.1. A maleinimid erőtere és elméleti rezgési színeképe

A MIM erőterének számításához is a korábban már bemutatott és a piridinre és uracilra alkalmazott számítási módszert alkalmaztuk.

A MIM geometriája a 9. ábrán volt látható: a molekula planáris, C_{2v} szimmet-

TÁBLÁZAT
állandói*

Δr_5^U	Δr_6^U	$\bar{\alpha}_1^U$	$\bar{\alpha}_2^U$	$\bar{\alpha}_3^U$	β_1^U	β_2^U	β_3^U	β_4^U	β_5^U	β_6^U
10,131 (27,734)										
-0,008 (-0,019)	6,671 (14,517)									
-0,204 (-0,283)	0,143 (0,177)	1,706 (1,203)								
0,136 (0,188)	0,074 (0,091)	-0,053 (-0,037)	1,600 (1,128)							
-0,235 (-0,326)	0,140 (0,173)	0,023 (0,016)	-0,062 (-0,044)	1,683 (1,187)						
-0,008 (-0,017)	0,008 (0,014)	0,029 (0,030)	0,046 (0,048)	0,066 (0,070)	0,447 (0,706)					
-0,001 (-0,003)	-0,003 (-0,006)	0,009 (0,009)	-0,069 (-0,073)	-0,048 (-0,052)	0,003 (0,005)	0,380 (0,600)				
0,016 (0,026)	0,003 (0,004)	-0,064 (-0,053)	0,137 (0,114)	0,034 (0,028)	-0,015 (-0,019)	0,010 (0,013)	1,022 (1,005)			
0,010 (0,015)	0,005 (0,007)	0,001 (0,001)	-0,006 (-0,005)	0,115 (0,089)	-0,002 (-0,002)	-0,010 (-0,012)	0,020 (0,019)	0,641 (0,553)		
-0,001 (-0,001)	-0,003 (-0,004)	-0,006 (-0,005)	-0,062 (-0,052)	-0,051 (-0,042)	-0,016 (-0,019)	-0,007 (-0,008)	-0,040 (-0,040)	0,005 (0,005)	1,012 (0,995)	
-0,021 (-0,033)	-0,012 (-0,017)	-0,003 (-0,002)	0,088 (0,068)	-0,048 (-0,037)	-0,005 (-0,006)	-0,009 (-0,010)	-0,007 (-0,006)	-0,013 (-0,011)	0,010 (0,009)	0,640 (0,551)

riájú. Az erőállandók számításához felhasznált belső koordinátákat [32] alapján állítottuk össze, ezek a 13. táblázatban láthatók.

Majd meghatároztuk a korrigálatlan erőállandókat (amelyekből néhányat a 14. és 15. táblázatban zárójelben tüntettünk fel). Ezek segítségével kiszámítható volt a rezgési színekép is.

A MIM 24 alaprezgése közül 17 síkbeli, 7 pedig a síkra merőleges deformációs rezgés. A 17 síkbeli rezgés közül 9 az A_1 osztályhoz, 8 a B_1 osztályhoz tartozik, míg a 7 síkra merőleges deformációs rezgés megoszlása: $3A_2 + 4B_2$. Valamennyi rezgés Raman-aktív, az infravörös színeképben azonban az A_2 specieszbe tartozó normálrezgések nem jelennek meg.

12. TÁBLÁZAT
Az uracil síkra merőleges deformációs erőállandói*

	τ_1^U	τ_2^U	τ_3^U	γ_1^U	γ_2^U	γ_3^U	γ_4^U	γ_5^U	γ_6^U
τ_1^U	0,317 (0,275)								
τ_2^U	-0,098 (-0,085)	0,311 (0,270)							
τ_3^U	-0,078 (-0,067)	0,100 (0,087)	0,239 (0,207)						
γ_1^U	0,144 (0,170)	-0,132 (-0,155)	-0,115 (-0,135)	0,460 (0,737)					
γ_2^U	-0,181 (-0,213)	0,199 (0,234)	0,091 (0,107)	-0,097 (-0,155)	0,401 (0,641)				
γ_3^U	0,024 (0,026)	0,032 (0,035)	0,073 (0,077)	-0,046 (-0,066)	-0,016 (-0,023)	0,556 (0,732)			
γ_4^U	-0,131 (-0,123)	-0,062 (-0,058)	-0,112 (-0,104)	-0,014 (-0,018)	-0,001 (-0,001)	-0,034 (-0,039)	0,184 (0,186)		
γ_5^U	0,067 (0,072)	0,064 (0,068)	0,0 (0,0)	-0,003 (-0,004)	-0,009 (-0,014)	-0,006 (-0,008)	-0,017 (-0,019)	0,594 (0,782)	
γ_6^U	-0,125 (-0,117)	-0,032 (-0,030)	0,104 (0,097)	-0,022 (-0,028)	0,036 (0,046)	-0,008 (-0,009)	0,010 (0,010)	-0,011 (-0,013)	0,183 (0,185)

* A jelölés magyarázata megtalálható a 10. táblázatban. Mértékegység: vö. 6. táblázattal.
A zárójelben levő értékek a direkt számítással nyert, korrigálatlan CNDO erőállandók.

13. TÁBLÁZAT

A maleinimid belső koordinátái

A belső koordináták sorszáma	Típusa	A koordináták definíciója*	A koordináta jelentése
1.	nyújtás (Δr_1^{MIM})	$\nu(\text{N}_1-\text{H})$	N—H kötéshossz-nyújtás
2.	nyújtás (Δr_2^{MIM})	$\nu(\text{C}_3-\text{H})$	C—H kötéshossz-nyújtás
3.	nyújtás (Δr_3^{MIM})	$\nu(\text{C}_4-\text{H})$	C—H kötéshossz-nyújtás
4.	nyújtás (Δr_4^{MIM})	$\nu(\text{C}_2=\text{O})$	C=O kötéshossz-nyújtás
5.	nyújtás (Δr_5^{MIM})	$\nu(\text{C}_5=\text{O})$	C=O kötéshossz-nyújtás
6.	nyújtás (ΔR^{MIM})	$\nu(\text{N}_1-\text{C}_2)$	N—C kötéshossz-nyújtás
7.	nyújtás (ΔR_2^{MIM})	$\nu(\text{N}_1-\text{C}_5)$	N—C kötéshossz-nyújtás
8.	nyújtás (ΔR_3^{MIM})	$\nu(\text{C}_2-\text{C}_3)$	C—C kötéshossz-nyújtás
9.	nyújtás (ΔR_4^{MIM})	$\nu(\text{C}_5-\text{C}_4)$	C—C kötéshossz-nyújtás
10.	nyújtás (ΔR_5^{MIM})	$\nu(\text{C}_3-\text{C}_4)$	C—C kötéshossz-nyújtás
11.	hajlítás (β_1^{MIM})	$\beta(\text{H}-\text{N}_1-\text{C}_2) - \beta(\text{H}-\text{N}_1-\text{C}_5)$	CNH kötésszög-def.
12.	hajlítás (β_2^{MIM})	$\beta(\text{H}-\text{C}_3-\text{C}_2) - \beta(\text{H}-\text{C}_3=\text{C}_4)$	CCH kötésszög-def.
13.	hajlítás (β_3^{MIM})	$\beta(\text{H}-\text{C}_4-\text{C}_5) - \beta(\text{H}-\text{C}_4=\text{C}_3)$	CCH kötésszög-def.
14.	hajlítás (β_4^{MIM})	$\beta(\text{O}=\text{C}_2-\text{N}_1) - \beta(\text{O}=\text{C}_2-\text{C}_3)$	NCO kötésszög-def.
15.	hajlítás (β_5^{MIM})	$\beta(\text{O}=\text{C}_5-\text{N}_1) - \beta(\text{O}=\text{C}_5-\text{C}_4)$	NCO kötésszög-def.
16. \neq	hajlítás ($\bar{\alpha}_1^{\text{MIM}}$)	$\alpha(\text{C}_5-\text{N}_1-\text{C}_2) +$ $+ a[\alpha(\text{N}_5-\text{C}_2-\text{C}_3) +$ $+ \alpha(\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4)] +$ $+ b[\alpha(\text{C}_2-\text{C}_3=\text{C}_4) +$ $+ \alpha(\text{C}_5-\text{C}_4=\text{C}_3)]$	gyűrűdeformáció (síkban)
17. \neq	hajlítás ($\bar{\alpha}_2^{\text{MIM}}$)	$(a-b)[\alpha(\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_3) -$ $- \alpha(\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4)] +$ $+ (1-a)[\alpha(\text{C}_2-\text{C}_3=\text{C}_4) -$ $- \alpha(\text{C}_5-\text{C}_4=\text{C}_3)]$	gyűrűdeformáció (síkban)
18.	síkra merőleges deformáció (γ_1^{MIM})	$\gamma(\text{H}-\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_5)$	H kimozdul a $\text{C}_5\text{N}_1\text{C}_2$ síkból
19.	síkra merőleges deformáció (γ_3^{MIM})	$\gamma(\text{H}-\text{C}_3-\text{C}_4-\text{C}_2)$	H kimozdul a $\text{C}_2\text{C}_3\text{C}_4$ síkból
20.	síkra merőleges deformáció (γ_5^{MIM})	$\gamma(\text{H}-\text{C}_4=\text{C}_3-\text{C}_5)$	H kimozdul a $\text{C}_3\text{C}_4\text{C}_5$ síkból
21.	síkra merőleges deformáció (γ_4^{MIM})	$\gamma(\text{O}=\text{C}_2-\text{N}_1-\text{C}_3)$	O kimozdul az $\text{N}_1\text{C}_2\text{C}_3$ síkból
22.	síkra merőleges deformáció (γ_5^{MIM})	$\gamma(\text{O}=\text{C}_5-\text{N}_1-\text{C}_4)$	O kimozdul a $\text{C}_4\text{C}_5\text{N}_1$ síkból
23. \neq	torzió (τ_1^{MIM})	$b[\tau(\text{C}_5-\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_3) +$ $+ \tau(\text{C}_2-\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4)] +$ $+ \tau(\text{C}_2-\text{C}_3=\text{C}_4-\text{C}_5) +$ $+ a[\tau(\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_3=\text{C}_4) +$ $+ \tau(\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4=\text{C}_3)]$	gyűrűtorzió
24. \neq	torzió (τ_2^{MIM})	$(a-b)[\tau(\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_3=\text{C}_4) -$ $- \tau(\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4=\text{C}_3)] +$ $+ (1-a)[\tau(\text{C}_2-\text{N}_1-\text{C}_5-\text{C}_4) -$ $- \tau(\text{C}_5-\text{N}_1-\text{C}_2-\text{C}_3)]$	gyűrűtorzió

* lásd a 10. táblázat megjegyzéseit; a MIM felső index a maleinimidet jelöli.
 $\neq a = \cos 144^\circ$, $b = \cos 72^\circ$

	Δr_1^{MIM} (Δr_4^{U})	Δr_2^{MIM} (Δr_2^{U})	Δr_3^{MIM} (Δr_2^{U})	Δr_4^{MIM} (Δr_3^{U})	Δr_5^{MIM} (Δr_3^{U})	ΔR_1^{MIM} (ΔR_3^{U})	ΔR_2^{MIM} (ΔR_8^{U})	ΔR_3^{MIM} (ΔR_2^{U})
Δr_1^{MIM}	6,747 (14,685)							
Δr_2^{MIM}	0,0 (0,0)	5,304 (11,959)						
Δr_3^{MIM}	0,0 (0,0)	-0,001	5,304 (11,959)					
Δr_4^{MIM}	-0,005 (-0,012)	0,002	0,006	11,031 (30,194)				
Δr_5^{MIM}	-0,005 (-0,012)	0,006	0,002	0,075	11,031 (30,194)			
ΔR_1^{MIM}	0,147 (0,401)	0,011	-0,037	0,740	-0,092	5,502 (18,729)		
ΔR_2^{MIM}	0,147 (0,401)	-0,037	-0,011	-0,092	0,740	0,378	5,502 (18,729)	
ΔR_3^{MIM}	0,012 (0,032)	0,126	0,014	0,474	-0,053	0,374	0,0	4,896 (15,364)
ΔR_4^{MIM}	0,012 (0,032)	0,014	0,126	-0,053	0,474	0,0	0,374	0,027
ΔR_5^{MIM}	-0,037 (-0,089)	0,204	0,204	-0,089	-0,089	0,013	0,013	0,424
β_1^{MIM}	0,0 (0,0)	0,004	-0,004	0,021	-0,021	0,102	-0,102	0,008
β_2^{MIM}	0,003 (0,005)	-0,006	0,009	-0,003	0,0	0,013	-0,010	0,106
β_3^{MIM}	0,003 (0,005)	0,009	-0,006	0,0	-0,003	-0,010	0,013	0,010
β_4^{MIM}	-0,011 (-0,016)	0,009	-0,005	0,043	0,024	0,278	-0,057	-0,192
β_5^{MIM}	-0,011 (-0,016)	-0,005	0,009	0,024	0,043	-0,057	0,278	-0,002
\bar{a}_1^{MIM}	-0,222 (-0,280)	-0,058	-0,058	0,296	0,296	0,050	0,050	-0,113
\bar{a}_2^{MIM}	0,0 (0,0)	-0,226	0,226	0,187	-0,187	0,025	-0,025	0,059

* A jelölés magyarázata megtalálható a 10. és 13. táblázatban. Zárójelben tüntettük fel a direkt számítással nyert, korrigálatlan CNDO-erőállandókat (az 1. oszlopban és a diagonális elemekre). A fejlécben — ahol lehetett — zárójelben jelöltük a megfelelő uracil-koordinátát is. Mértékegység: vö. 6. táblázattal.

A számított színképet a *Woldbaek* és *mtsai* által közölt [179] kísérleti színképre az I.5.2. fejezetben bemutatott skálázási eljárással a 14. és 15. táblázatban bemutatott erőter és a 16. táblázatban látható elméleti színkép kapható. A felhasznált skála-faktorok a következő alfejezetbe kerültek.

A MIM kötésviszonyait mutató erőállandók közül érdekes néhány értéket a piridin (P) erőállandóival összevetni (14. és 6. táblázat).

A CH nyújtási diagonális erőállandók jó egyezést mutatnak ($F_{\text{CH}}^{\text{MIM}} = 5,30 \text{ N cm}^{-1}$, illetve $F_{\text{CH}}^{\text{P}} = 5,20 - 5,26 \text{ N cm}^{-1}$), de érthetően különböznek a CN és CC nyújtások diagonális erőállandói ($F_{\text{CN}}^{\text{MIM}} = 5,50$, illetve $F_{\text{CC}}^{\text{MIM}} = 4,89 \text{ N cm}^{-1}$, $F_{\text{CN}}^{\text{P}} = 7,15$, illetve $F_{\text{CC}}^{\text{P}} = 6,15 - 6,20 \text{ N cm}^{-1}$).

TÁBLÁZAT
erőállandó*

ΔR_4^{MIM} (ΔR_2^{U})	ΔR_5^{MIM} (ΔR_1^{U})	β_1^{MIM} (β_4^{U})	β_2^{MIM} (β_2^{U})	β_3^{MIM} (β_2^{U})	β_4^{MIM} (β_3^{U})	β_5^{MIM} (β_3^{U})	$\bar{\alpha}_1^{\text{MIM}}$	$\bar{\alpha}_2^{\text{MIM}}$
4,896 (15,364) 0,424	8,807 (22,937)	0,549 (0,481)	0,373 (0,572)	0,373 (0,572)	0,929 (0,921)	0,929 (0,921)	1,803 (1,317)	1,484 (1,084)
-0,008	0,0	0,009	-0,007	0,015	0,015	0,125	0,0	
0,010	-0,149	0,009	0,009	0,015	0,009	0,042		
0,106	-0,149	-0,009	-0,007	0,015	0,009	0,125		
-0,002	-0,015	-0,009	0,009	0,015	0,009	0,125		
-0,192	-0,015	0,009	0,015	0,009	0,042	0,125		
-0,113	0,094	0,0	-0,057	-0,057	0,125	0,125		
-0,059	0,0	-0,076	0,010	-0,010	-0,015	0,015		

A piridin jóval nagyobb értékei erősebb kötést, kisebb atomtávolságot mutatnak: az erőállandók mátrixából ugyanaz a kvalitatív kép kapható meg, amely a geometriaszámítás során adódott—a piridin kettőskötései delokalizáltak, szerkezete konjugált a maleinimid lokalizált egyes és kettőskötéseivel szemben—mert $F_{\text{C}=\text{C}}^{\text{MIM}} > F_{\text{C}=\text{C}}^{\text{P}}$ (azaz: $8,80 > 6,20 > 4,89$) és $F_{\text{C}=\text{N}}^{\text{P}} > F_{\text{C}=\text{N}}^{\text{MIM}}$ (azaz $7,15 > 5,50$).

A számított színeképől nyerhető egyéb fontos, de célkitűzésünk szempontjából mellékeredményre (a MIM rezgési színeképében néhány sáv besorolásának módosítása) a IV. 2.6.6. fejezetben térünk ki.

IV.2.4.1.2. A maleinimid skálafaktorai

A 14. és 15. táblázat erőállandóit olyképpen számítottuk (I.5.2. fejezet), hogy a zárójelben szereplő értékeket (direkt számítás) a 17. táblázatban felsorolt skálafaktorokkal szoroztuk be: a diagonális elemet a c_i faktorról, az F_{ij} elemeket pedig c_i és c_j mértani közepével.

15. TÁBLÁZAT
A maleinimid síkra merőleges deformációs erőállandói*

	γ_{14}^{MIM} (γ_4^U)	γ_{25}^{MIM} (γ_5^U)	γ_{32}^{MIM} (γ_2^U)	γ_{43}^{MIM} (γ_3^U)	γ_{53}^{MIM} (γ_3^U)	τ_1^{MIM}	τ_2^{MIM}
γ_1^{MIM}	0,198 (0,200)						
γ_2^{MIM}	0,011 (0,014)	0,440 (0,705)					
γ_3^{MIM}	0,011 (0,014)	0,093	0,440 (0,705)				
γ_4^{MIM}	-0,006 (-0,007)	-0,016	-0,046	0,478 (0,629)			
γ_5^{MIM}	-0,006 (-0,007)	-0,046	-0,016	-0,030	0,478 (0,629)		
τ_1^{MIM}	0,0 (0,0)	0,210	-0,210	0,057	-0,057	0,372 (0,322)	
τ_2^{MIM}	-0,175 (-0,164)	-0,022	-0,022	-0,009	-0,009	0,0	0,179 (0,155)

* A jelölés magyarázata megtalálható a 10. és 13. táblázatban. Zárójelben tüntettük fel a direkt számítással nyert korrigálatlan CNDO-erőállandókat (az 1. oszlopban és a diagonális elemekre). A fejlécben — ahol lehetett — zárójelben jelöltük a megfelelő uracil-koordinátát is. Mértékegység: vö. 6. táblázattal.

Az erőter korrekciójához (és az elméleti színekép illesztéséhez) 14 faktort használtunk, azaz minden minőségileg különböző belső koordináta-hoz külön faktort rendelünk. A piridinhez képest nagyszámú skálafaktor-készletet az indokolta, hogy minél pontosabb egyezést szándékoztunk elérni a MIM kísérleti és számított színeképe között, azért hogy a skálafaktorok minél nagyobb megbízhatósággal legyenek az uracilra átvihetők. (Az uracil elméleti színeképének megbízhatósága és elérhető legnagyobb pontossága azért volt lényeges, mert a munka e stádiumában nem állt kísérleti színekép rendelkezésünkre.)

A 14 empirikus szorzótényező még mindig majd egy nagyságrenddel kisebb, mint a normálkoordináta-analízis 97 erőállandó-paramétere; az erőállandók megbízhatósága esetünkben a direkt számítás miatt lényegesen nagyobb, s a rezgési frekvenciák reprodukálhatósága is kielégítő.

Megjegyezzük még, hogy a MIM esetében lenne mód a paraméterek számának csökkentésére, hiszen a numerikusan alig különböző skálafaktorok összevonhatók lennének, ha közös átlagértéket kapnak: pl. $c(C-H)=c(N-H)=0,45$, $c(C=O)=c(C=C)=0,37$; $c(C-C)=c(N-C)=0,305$; $c(N-H \text{ def.})=c(\text{torzió})=1,145$. Az ily módon 10-re csökkent skálafaktorkészlettel a molekula síkra merőleges rezgései ugyanolyan pontossággal számíthatók, s a síkrezgések számításának pontossága (azaz a számított érték eltérése a kísérletitől) sem romlik számottevően: a négyzetes eltérés 4 cm^{-1} -el lesz nagyobb.

A fenti egyszerűsítésről azért mondtunk le, mert az uracilszínekép számításának maximális pontosságát tartottuk szem előtt. Az egyszerűsítések ugyanis az uracil-színekép egyes frekvenciáinak számításakor a hibák kumulálódásához vezethettek volna, amelyek eredménye lehet egy-egy bonyolult normálrezgéshez tartozó frekvencia kiugróan téves értéke is.

16. TÁBLÁZAT

A maleinimid kísérleti [179] és számított színeképe

A rezgés típusa	Szimmm.**	Kísérleti érték (cm ⁻¹)	Számított érték (cm ⁻¹)	A rezgés jellege* (TED alapján)
Síkbeli rezgések				
ν_1	A_1	3482	3482	$\nu(\text{NH})$
ν_2	A_1	3090	3111	$\nu(\text{CH})$
ν_{17}	B_1	3115	3093	$\nu(\text{CH})$
ν_3	A_1	1775	1781	$\nu(\text{CO})$
ν_{18}	B_1	1756	1748	$\nu(\text{CO})$
ν_4	A_1	1580	1581	$\nu(\text{C}=\text{C})$
ν_{19}	B_1	1396	1402	$\beta(\text{NH})$
ν_{20}	B_1	1322	1325	$\nu(\text{CN}), \beta(\text{CO})$
ν_5	A_1	1335	1320	$\beta(\text{NH}), \nu(\text{CC}), \alpha(\text{CCC}),$ ill. $\alpha(\text{CCN})$
ν_{21}	B_1	1130	1153	$\beta(\text{CH})$
ν_6	A_1	1015	997	$\beta(\text{CH})$
ν_7	A_1	906	910	$\nu(\text{CC})$
ν_{22}	B_1	912	905	$\nu(\text{CN}), \nu(\text{CC}), \alpha(\text{CCC}),$ ill. $\alpha(\text{CCN})$
ν_{23}	B_1	668	674	$\alpha(\text{CCC}), \text{ill. } \alpha(\text{CCN})$
ν_8	A_1	639	632	$\alpha(\text{CCC}), \text{ill. } \alpha(\text{CCN})$
ν_{24}	B_1	536	552	$\beta(\text{CO})$
ν_9	A_1	400	381	$\beta(\text{CO})$

Közepes négyzetes eltérés: 13,4 cm⁻¹

Síkra merőleges rezgések

ν_{10}	A_2	954	944	$\gamma(\text{CH})$
ν_{13}	B_2	831	845	$\gamma(\text{CH}), \gamma(\text{CO})$
ν_{11}	A_2	773	787	$\gamma(\text{CO}), \tau$
ν_{14}	B_2	620	619	$\gamma(\text{CH}), \gamma(\text{CO})$
ν_{15}	B_2	504	504	$\gamma(\text{NH})$
ν_{12}	A_2	295	256	τ
ν_{16}	B_2	52	63	τ

Közepes négyzetes eltérés: 17 cm⁻¹

* Jelölés a 3., 7. és 13. táblázatban

** A maleinimidet ugyanabba a síkba helyeztük, mint a piridint ezáltal a szimmetria jelölése a jelen dolgozatban [179]-hez képest megváltozott: az ottani B_2 speciesz itt B_1 .

Ha a 17. táblázat értékeit a 4. és 5. táblázathoz hasonlítjuk, arra a következtetésre jutunk, hogy a CNDO/2 módszer a laktámgyűrűs vegyületek erőterének számításakor a korábbiaktól eltérő hibákat okoz. A CH nyújtások skálafaktorai az eddigi számítások során 0,382-nek adódtak [30, 37], s ez az érték az aromás gyűrűkben sem változott (a benzolban [33] vagy a piridinben [39]). Itt értéke 0,44. Láttuk, már a piridinben befolyásolta az N a C—C nyújtásokat: a benzol 0,38(2)-es $c(\text{C}—\text{C})$ értéke 0,34(4)-re csökkent a piridinben — jelen esetben ez a tendencia tovább folytatódik: a $c^{\text{MIM}}(\text{C}—\text{C})$ értéke 0,32.

A deformációs erőállandók hibája kevésbé szisztematikus, mégis 12 fluorobenzol síkra merőleges rezgéseit mindössze két skálafaktorral sikerült leírni egy torziós és egy síkra merőleges deformációs (out-of-plane) skálafaktorral [35].

17. TÁBLÁZAT

A MIM elméleti spektrumának illesztéséhez használt
korrekciós faktorok értékei

In-plane (síkbeli)		Out-of-plane (síkra merőleges)	
A skálafaktor			
tipusa*	értéke	tipusa*	értéke
c(C—C)	0,32	c(torzió)	1,15
c(C=C)	0,38	c(C—H out)	0,62
c(C—N)	0,29	c(C=O out)	0,76
c(C—H)	0,44	c(N—H out)	0,99
c(C=O)	0,36(5)		
c(N—H)	0,46		
c(gyűrű def.)	1,37		
c(C=O def.)	1,01		
c(C—H def.)	0,65		
c(N—H def.)	1,14		

* Zárójelben a kapcsolódó belső koordináta típusa: „def.” a síkbeli, „out” a síkra merőleges deformációt jelenti, a külön jelzés nélküliek nyújtási koordináták.

Ugyanezek a faktorok egyéb aromás rendszerekre, mint pl. a piridin vagy a pirrol is alkalmazhatók voltak [191]. Esetünkben 3 síkra merőleges deformációs faktorra volt szükség, amelyek jelentős mértékben különböztek egymástól (l. 17. táblázat), de különböztek az aromás rendszerekre alkalmazott c(out)=0,58 értéktől is.

IV.2.4.2. Az uracil korrigált erőtere

A 17. táblázatban szereplő skálafaktorok segítségével korrigáltuk az uracil erőterét, az I.5.2. fejezetben leírt módon. A 11. és 12. táblázatban bemutatott erőállandó-értékeket kaptuk.

Összehasonlítva néhányat a MIM erőállandóival elég jó egyezés tapasztalható:

	MIM	U
Diagonális erőállandók		
F_{CC}	4,89*	5,16
$F_{C=C}$	8,80	8,46
F_{CN}	5,50	5,60—5,80
F_{NH}	6,74	6,59
$F_{C=O}$	11,03	10,45—10,13
F_{CH}	5,30	5,20—5,34
Kölcsönhatási erőállandók		
$F_{C=O/NH}$	—0,005	—0,008
$F_{C—C/NH}$	0,012	0,013
$F_{CH/C=C}$	0,20	0,21, ill. 0,20
$F_{CO/CN}$	0,74	0,78
$F_{CN/CH}$	0,15	0,18
$F_{CO/CH}$	0,005	0,005

* Mértékegység: vö. 6. táblázattal.

A fenti táblázatban gyakorlatilag a két független CNDO/2 erőállandó-számítást hasonlítottuk össze (mindkét erőteret a 17. táblázat skálafaktoraival korrigáltuk: nyilvánvaló, hogy a megfelelő korrigálatlan erőállandó-értékek ugyanilyen arányban egyeznek), s ez az összehasonlítás azt mutatta, hogy az uracil egyes erőállandóit a CNDO/2 módszer hasonló pontossággal számítja, mint a maleinimid megfelelő erőállandóit.

Az erőállandók egyezésének mértéke nemcsak alátámasztja az uracil rezgési színeképének számítására alkalmazott elvet, nevezetesen, hogy a szerkezetileg hasonló MIM skálafaktorait használjuk az U erőterének korrekciójára, s elméleti színeképének meghatározására, hanem lehetőséget nyújt arra is, hogy az uracil számított frekvenciáinak kísérleti (ismeretlen) frekvenciáktól való különbözőségének mértékére a MIM elméleti színeképének négyzetes hibája alapján hozzávetőleges becslést is kaphassunk. (Figyelembe véve a deformációs rezgések során tapasztalt kevésbé szisztematikus hibát, valamint az eltérő gyűrűtagszámot, az uracil színeképszámításának négyzetes hibáját 20–25 cm^{-1} -re becsüljük.)

IV.2.5. Az uracil rezgési színeképe

Az uracil rezgési színeképét a 11. és a 12. táblázat nem zárójelben szereplő erőállandóinak felhasználásával kiszámítva, az uracil félempirikus módszerrel számított „tisztán” elméleti színeképe kapható, azaz olyan eredmény, amely semmilyen uracilra vonatkozó kísérleti adatot nem használ fel.

A számított színekép a 18. táblázatban látható.

Ha e táblázat elemeit a 16. táblázat megfelelő elemeihez hasonlítjuk, az U és a MIM csoportrezgéseikhez tartozó frekvenciák összevethetőségéről kapunk képet. Az összehasonlítás azt mutatja, hogy e csoportfrekvenciák ugyanúgy egyeznek, mint a csoportfrekvenciák más hasonló molekula-sorozatok esetében [192].

A fenti egyezésből az a következtetés vonható le, hogy az uracil ily módon számított frekvenciái reálisak, az alkalmazott eljárás az uracil-gőz színeképét megfelelően jósolja meg.

A spektrumjósítás megbízhatóságára e csoportfrekvencia-egyezés mellett — amint azt a IV.2.4.2. fejezetben bemutattuk — az U és MIM erőállandóinak egyezése alapján tehetünk becslést, minthogy az erőállandók két független számítás eredményeként adódtak.

A célkitűzés, az uracil-gőz rezgési színeképének meghatározása, a célkitűzéskor rendelkezésre álló kísérleti adatok alapján az eddigiekben bemutatott módon volt megvalósítható, s az itt közölt eredményekhez (18. táblázat) vezetett.

A számítás ellenőrzése, azaz a spektrumjósítás megbízhatóságának meghatározása természetesen csak az uracil-gőzről készült kísérleti színekép alapján végezhető el megfelelően. A kísérleti színeképet, amint azt a IV.2.1. fejezetben már említettük, kooperációs partnerünk a közelmúltban vette fel Rómában. Ennek alapján nemcsak a spektrumjósítás ellenőrzésére nyílt lehetőség, hanem az eredeti célkitűzés további feladattal történő kibővítésére is: a kísérleti színekép besorolására, s a skálafaktorok átvihetőségének ellenőrzésére.

18. TÁBLÁZAT

Az uracil (MIM-skálafaktorokkal számított) elméleti rezgési színeképe

A rezgés típusa	Számított* értéke (cm^{-1})	Besorolás**
Síkbeli rezgések		
ν_1	3460	$\nu(\text{N}_1\text{—H})$
ν_2	3438	$\nu(\text{N}_3\text{—H})$
ν_3	3112	$\nu(\text{C}_5\text{—H})$
ν_4	3067	$\nu(\text{C}_6\text{—H})$
ν_5	1765	$\nu(\text{C}_2=\text{O})$
ν_6	1739	$\nu(\text{C}_4=\text{O})$
ν_7	1614	$\nu(\text{C}=\text{C})$
ν_8	1503	$\beta(\text{N}_1\text{—H}) + \nu(\text{C}_2=\text{O}) + \nu(\text{C}_6\text{—N}_1)$
ν_9	1446	$\beta(\text{N}_3\text{—H}) + \nu(\text{C—N}) + \nu(\text{C}_2=\text{O})$
ν_{10}	1392	$\nu(\text{C—N}) + \beta(\text{N}_1\text{—H})$
ν_{11}	1340	$\beta(\text{N}_3\text{—H})$
ν_{12}	1225	$\beta(\text{C—H})$
ν_{13}	1104	$\beta(\text{C—H}) + \nu(\text{C—N})$
ν_{14}	1040	$\alpha(\text{gyűrű}) + \nu(\text{C}_6\text{—N})$
ν_{15}	996	$\beta(\text{C—H})$
ν_{16}	923	$\nu(\text{C—C}) + \nu(\text{C—N})$
ν_{17}	754	$\nu(\text{C—C}) + \alpha(\text{gyűrű}) + \nu(\text{C—N})$
ν_{18}	597	$\alpha(\text{gyűrű})$
ν_{19}	548	$\alpha(\text{gyűrű})$
ν_{20}	525	$\beta(\text{C}=\text{O})$
ν_{21}	365	$\beta(\text{C}=\text{O})$
Síkra merőleges rezgések		
ν_{22}	921	$\gamma(\text{C}_6\text{—H})$
ν_{23}	813	$\gamma(\text{C}_4=\text{O}) + \gamma(\text{C—H})$
ν_{24}	773	$\gamma(\text{C}_2=\text{O})$
ν_{25}	669	$\gamma(\text{C}_5\text{—H})$
ν_{26}	519	$\gamma(\text{N}_1\text{—H})$
ν_{27}	469	$\gamma(\text{N}_3\text{—H})$
ν_{28}	394	τ
ν_{29}	151	τ
ν_{30}	86	τ

* MIM faktorokkal.

** TED alapján.

IV.2.6. Az uracil-gőz kísérleti színeképe, a színekép besorolása.

Összehasonlító, ellenőrző számítások a kísérleti színekép alapján

IV.2.6.1. Az uracil-gőz kísérleti (IR) színeképe

Az uracil-gőz infravörös színeképét azért nehéz regisztrálni, mert az uracil kis tenziójú, bomlás közben olvadó anyag (O.p. 611 K). Az infravörös technika legújabb eredményei tették lehetővé a fellépő kísérleti nehézségek leküzdését. *Nunziante-Cesaro* és *mtsai* a közelmúltban személyes közlésként bocsátották rendelkezésre e téren elért eredményeiket [180, 181, 182].

A többszörös átkristályosítással tisztított uracilmintát 355 K-re melegítették. Ekkor elegendően nagy gőznyomás alakult ki ahhoz, hogy sugárforrásként dióda-

lézert alkalmazva a színekép rögzíthető legyen. A felvételhez LS—3 típusú Laser—Source (USA) spektrométert használtak. A felvett színekép [181] részletes elemzést a közeljövőben közlik. Sikert az uracil-gőz színeképét hagyományos gerjesztő forrással ellátott spektrofotométerrel (Perkin Elmer 180, USA) is regisztrálniuk: ekkor fűthető gázküvetéket használtak [182]; a részletes kísérleti körülményekre publikálható dolgozatukban térnek ki. *Nunziante-Cesaro* és *Dobos* [180] argon mátrixban is felvették az uracil színeképét, amelyet szintén figyelembe vettünk az izolált uracil rezgési sávjainak kiválasztásakor.

A kísérleti színeképek a 19. táblázatban láthatók. Látható, hogy a dióda-lézerrel készített felvétel [181] tartalmazza a legtöbb sávot: a másik két módon készített infravörös színekép [180, 182] szinte valamennyi sávja a [181] felvételen is jelentkezik.

Ezek alapján, ahol lehetett, a dióda-lézeres technikával készült [181] felvétel megfelelő sávját választottuk alapsávnak.

Az alapsávokat a kísérleti színeképből először a MIM-skálafaktoraival számított uracil-színekép (18. táblázat) és a 19. táblázat A oszlopa alapján választottuk ki. Ezáltal „nyers” besorolást kaptunk. E „nyers” besorolás alapsávjaira illesztve az uracil számított színeképét, a számított frekvenciák pontossága nő. Ha a számított és a kísérleti érték jelentős mértékben eltér, avagy ha a számítás végén a végső erőtér irreális erőállandókat eredményez, megvizsgálandó, hogy módosítható-e a „nyers” besorolás, jobban egyező, olyan frekvenciák kiválasztásával, amelyek a spektroszkópiai tapasztalatokkal összhangban vannak. Ilyen visszacsatolások, módosítások után alakul ki a végleges besorolás, amelyet a 19. táblázat mutat.

A kísérleti színeképet először a MIM-skálafaktorokkal kiszámított uracil színeképhez hasonlítjuk, ez az összehasonlítás mutatja a IV.2.5. fejezetben bemutatott spektrumszámítási módszer alkalmazhatóságát, megbízhatóságát.

IV.2.6.2. A MIM-skálafaktorokkal számított elméleti uracil színekép összehasonlítása a kísérleti uracil színeképpel

A MIM-faktorokkal számított elméleti uracil színekép a 19. táblázat A oszlopában található, a kísérleti frekvenciák (külön oszlopban az általunk alaprezgésnek besorolt frekvenciák) szintén a 19. táblázatban láthatók. Az összehasonlítást a 11. és 12. ábra (kísérleti és A oszlop) szemlélteti.

Az összehasonlításból kitűnik, hogy a frekvenciák egyezése megfelelő, a számított értékek kielégítő pontosságúak. (A legrosszabb egyezés 3% körüli.)

A négyzetes eltérés a síkbeli rezgések frekvenciáira 22 cm^{-1} , a síkra merőleges frekvenciákra 28 cm^{-1} .

Figyelembe véve, hogy ismert kísérleti színeképű vegyületek elméleti és kísérleti színeképének legkevesbé egyező frekvenciái szintén kb. 3%-ra térnek el és a kísérleti és elméleti színekép négyzetes eltérése $14\text{--}22\text{ cm}^{-1}$ ([35], [37], [39], illetve l. a piridinről szóló, IV.1. fejezetet), megállapítható, hogy a MIM-skálafaktoraival számított uracil-színekép ugyanolyan pontossággal egyezik az uracil kísérleti színeképével, mint egy átlagos molekula kísérleti és elméleti színeképe. Azaz: a MIM-skálafaktorainak transzferálhatósága az uracilra igen jó.

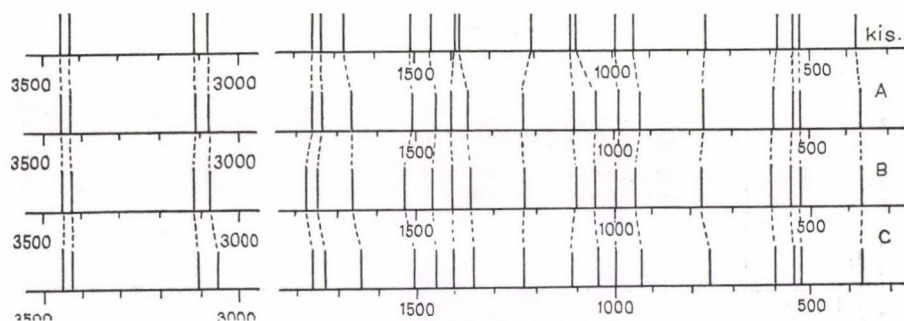
Természetes, hogy az egyezés a síkrezgések esetén jobb. A síkra merőleges rezgések esetében ugyanis az eltérő gyűrűtagszám hatása nagyobb, s ez azt eredményezi, hogy a MIM és az U síkra merőleges rezgésekhez tartozó skálafaktora várhatóan

1735	s	1739	vs	1734	vs	1734	ν_5	1765	1759	1744	1788	$C_2=O$ nyújtás
1730	s											
1725	s											
1720	s											
1710	sh											
1698	s											
1693	sh	1684	vs	1688	vs	1688	ν_6	1739	1722	1715	681	$C_4=O$ nyújtás
1676	sh	1629	m	1632	vs	1632	ν_7	1614	1622	1621	41	$C=C$ nyújtás
1616	m											
1614	m											
1564	w											
1525	vw	1518	m	1517	m	1517	ν_8	1503	1510	1505	91	N_1-H def. + $C_2=O$ nyújt. + $C-N$ nyújt.
1463	m	1460	m	1480	s	1460	ν_9	1446	1441	1453	20	N_3-H def. + $C-N$ nyújt. + $C_2=O$ nyújt.
1391	m	1400	m	1396	w	1396	ν_{10}	1392	1404	1400	211	$C-N$ nyújtás + N_1-H def.
1380	w	1383	m	1380	s	1380	ν_{11}	1340	1362	1371	7	$C-C$ nyújtás + $C-N$ nyújt. + N_3-H def.
				1341	vw							
				1317	vw							
				1302	vw							
		1272	sh	1297	vw							
		1245	s	1228	m	1245	ν_{12}	1225	1243	1238	5	$C-H$ def.
		1220	m	1202	vs							
				1146	vw							
				1131	vw							
				1129	vw							
				1106	sh	1106	ν_{13}	1104	1119	1115	39	$C-H$ def. + $C-N$ nyújt.
		1087	m	1098	vs	1089	ν_{14}	1040	1048	1058	21	$C-H$ def. + gyűrű def. + $C-N$ nyújt.
		995	mw	999	w	999	ν_{15}	996	1003	997	13	$C-H$ def.
				974	w							
				946	vw	946	ν_{16}	923	937	949	29	$C-C$ nyújt. + $C-N$ nyújt.
		880	vw	886	vw	886	ν_{22}	921	910	875	71	$C-H$ out
				868	vw							
				841	m							
				830	m							
820	w			810	vs	810	ν_{23}	813	807	832	190	$C_4=O$ out + $C-H$ out
807	vw	810	s	810	m							
800	s	789	m	797	m							
		780	s	780	s	780	ν_{17}	773	762	781	26	$C-C$ nyújt. + gyűrű def. + $C-N$ nyújt.

a 19. táblázat folytatása

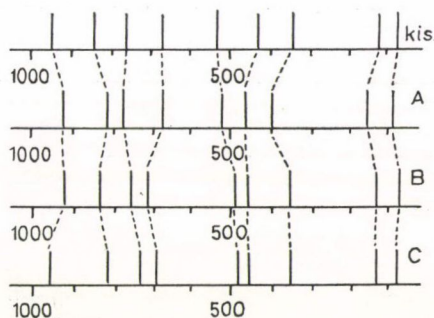
Kísérleti színekép						Az illeszt. felh. kis. frekv.	A rezg. jelölése	Számított színekép			I_{abs}	Besorolás
IR, mátrix [180] (II)		IR gőz [182] (PE 180)		IR gőz [181] (I) (LS—3)				A	B	C (III)		
ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}			ν_i	ν_i	ν_i		
764 753	s s	769 764	s sh	770 769 764 672	w s sh vw	769 672	ν_{24} ν_{25}	754 669	740 693	755 684	220 14	C ₂ =O out C—H out
661 655	vs sh	 530 588	 w m	 633 588 556 551 542 527	 m m m m m m	 588	 ν_{18}	 597	 601	 604	25	gyűrű def.
551 538 515	m sh m	 547	 ms	551 542 527	m m m	551 542 527	ν_{19} ν_{20}	548 525 519	549 527 496	553 532 496	27 39	gyűrű def. C=O def.
480 425 405 391 355	m m s s m	440 426 416 380 342 262 180	sh m m m m w w	440 422 411 377 339 258 185	m m m m m m m	440 377 340	ν_{26} ν_{27} ν_{21} ν_{28}	469 472 365 394	472 472 367 369	472 370 338	402 164 26 137	N—H out N—H out C=O def. torzió
				(120)		120	ν_{29}	151	136	119	11	torzió
				(70)		70	ν_{30}	86	77	66	3	torzió

* Megjegyzés: Az I, II és III jelű oszlopokat a 15. ábrán ábrázoltuk.



11. ábra. Az uracil síkban deformációs rezgéseinek mért és számított frekvenciái

Jelölés: kis: kísérleti, mért értékek
 A: a MIM skálafaktoraival számított értékek
 B: a közös skálafaktorokkal számított értékek
 C: az U skálafaktoraival számított értékek
 (vö. a 21. táblázattal)



12. ábra. Az uracil síkra merőleges deformációs rezgéseinek mért és számított frekvenciái Jelölés: l. a 11. ábrát

jobban különböznek majd. (Az egyetlen, kiugróan nagy hibával számított síkrezgés, ν_{14} is gyűrűdeformációhoz kapcsolódik.)

Másrészt azért is nagyobb a síkra merőleges rezgések négyzetes eltérése, mert relatíve a MIM esetében is rosszabbul egyeztek a számított és kísérleti értékek a síkra merőleges rezgéseknél, mint a síkbeli frekvenciák (MIM: síkra merőleges rezgések: 17 cm^{-1} , síkrezgések: 13 cm^{-1} ; az U-ra vonatkozó értékeket l. feljebb).

IV.2.6.3. Az uracil és a maleinimid közös illesztése

A 19. táblázat B oszlopában azok a frekvenciaértékek láthatók, amelyeket az uracilra oly módon kaptunk, hogy a kiválasztott uracil és maleinimid frekvenciák (19., illetve 16. táblázat) együttes figyelembevételével optimáltuk a skálafaktorok értékeit. A MIM-re vonatkozó értékek a 20. táblázat B oszlopában szerepelnek.

A 19. és 20. táblázatok B oszlopaikat a 11–14. ábrákon B-vel jelzett sorok mutatják.

20. TÁBLÁZAT
A maleinimid kísérleti és számított rezgési színeképe*

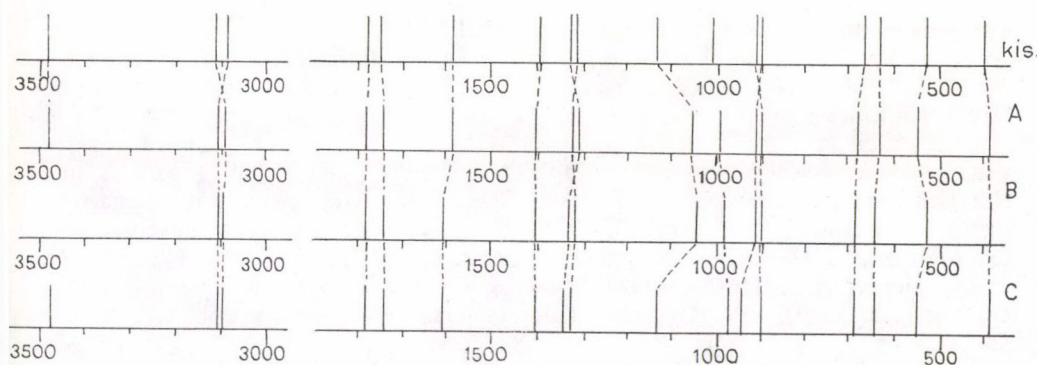
Kísérleti színekép [179]						Számított színekép											
Raman-oldat (I)		IR-oldat (II)		IR-gőz (III)		Besorolás	A (IV)	B	C	I_{abs}	szimm.	Besorolás (TED)					
ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}		ν_i	ν_i	ν_i								
3172 3108	m; P s; P	3525	w	3499 3482	sh s	2x ν_3 ; A_1 $\nu_3 + \nu_{18}$; B_1 ν_1 ; A_1 ν_1 (H-hid)	3482	3474	3471	0,5	A_1	N—H nyújtás (ν_1)					
		3490	w			3093 3111							3098 3117	3104 3124	15 22	B_1 A_1	C—H nyújtás (ν_{17}) C—H nyújtás (ν_2)
		3450	s														
		3300	m														
2950 2900	bd bd	3170	vw	3115 3090	vw		2x ν_i ; FR; A_1 ν_2 ; A_1 $\nu_4 + \nu_{19}$; B_1										
		3104	w														
		2990	w														
		2850	w			$\nu_4 + \nu_{20}$; A_1 2x ν_{19} ; A_1 $\nu_{19} + \nu_{21}$; A_1 $\nu_{18} + \nu_{23}$; A_1 $\nu_6 + \nu_{20}$; B_1 $\nu_3 + \nu_{24}$; B_1 $\nu_7 + \nu_{21}$; B_1 $\nu_6 + \nu_7$; A_1 $\nu_6 + \nu_{13}$; B_2 $\nu_{20} + \nu_{24}$; A_1 $\nu_7 + \nu_{22}$; FR; B_1 2x ν_7 ; FR; A_1 $\nu_8 + \nu_{21}$; FR; B_1 $\nu_{13} + \nu_{22}$; A_2 ν_3 ; A_1											
				2650	vw												
				2450	vw												
				2357	w												
				2310	m												
				2220	vw												
		2018	w	1995	w												
		1940	vw														
1828	s; P	1878	w	1865	w												
1803	s; P	1801	m	1790	sh												
		1814	w														
1773	sh	1783	sh														
1770	vs; P	1770	m	1775	sh		1781	1769	1789	24	A_1	C=O nyújtás (ν_3)					
				1762	sh												
		1758	w	1756	vs	ν_{18} ; B_1	1748	1731	1703	1364	B_2	C=O nyújtás (ν_{18})					
				1748	sh												
1730	m, D	1730	vs														
		1725	sh														
1697	sh	1710	sh			$\nu_5 + \nu_9$; FR; A_1 $\nu_6 + \nu_{23}$; FR; B_1 $\nu_{10} + \nu_{23}$; B_1											
		1600	w														
1586	vs; P	1583	w	1580	w	ν_4 ; A_1 $\nu_{12} + \nu_{20}$; B_2	1581	1590	1601	3	A_1	C=C nyújtás (ν_4)					
		1570	w														

1562	w					$\nu_7 + \nu_{23}; B_1$						
1353	m	1390 1331	m s	1396 1335	s	$\nu_{11} + \nu_{15}; FR; B_1$ $\nu_8; A_1$	1402 1320	1409 1342	1430 1343	12 122	B_1 A_1	N—H def. (ν_{19}) N—C nyújt. + C=O def. (ν_5)
		1340	sh	1322	sh	$\nu_{19}; B_1$	1325	1331	1310	14	B_1	N—H def. + C—C nyújt. + gyűrű def. (ν_{20})
1305	m; P	1288 1260	w sh	1285	w	$\nu_7 + \nu_9$ $\nu_{20}; B_1$ $2\nu_8; A_1$						
				1265	w	$\nu_7 + \nu_9; FR; A_1$						
		1143	w	1161	sh	$\nu_{12} + \nu_{13}; FR; B_1$						
1148	w	1138	s	1154	m							
				1137	sh							
				1130	s	$\nu_{21}; B_1$	1154	1155	1146	84	B_1	C—H def. (ν_{21})
				1121	sh							
1070	s; P	1118 1057	w w	1062	sh	$\nu_{10} + \nu_{16}; FR; B_1$						
				1045	sh							
		1061	sh	1030	sh	$\nu_2 + \nu_9; FR; B_1$						
				1015	m	$\nu_6; A_1$	997	989	977	2	A_1	C—H def. (ν_6)
				1000	sh							
954	vw					$\nu_{10}; A_2$	944	939	908	—	A_2	C—H out (ν_{10})
929	?	921	m	912	sh	$\nu_{22}; B_1$	905	914	930	27	B_1	C—N nyújt. + C—C nyújt. (ν_{22})
901	s; P	905	m	906	s	$\nu_7; A_1$	910	915	918	0,2	A_1	C—C nyújtás (ν_7)
				897	s							
				840	sh							
835	w	829	s	831	s	$\nu_{13}; B_2$	845	844	845		B_2	C—H out + C=O out (ν_{13})
				829	sh							
				825	sh							
773	w					$\nu_{11}; A_2$	787	776	783	—	A_2	C=O out + torzió (ν_{11})
		668	sh			$\nu_{14}; B_2$						
				578	sh							
676	w	670	s	668	s	$\nu_{23}; B_1$	674	683	695	40	B_1	gyűrű def. (ν_{23})
				662	sh							
642	s; P	640	w	639	vw	$\nu_8; A_1$	623	641	642	9	A_1	gyűrű def. (ν_8)
				635	vw							

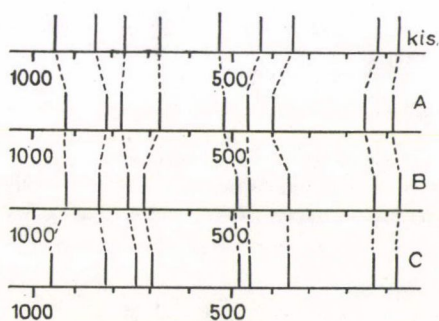
20. táblázat folytatása

Kísérleti szinkép [179]						Számított szinkép						
Raman-oldat (I)		IR-oldat (II)		IR-gőz (III)		Besorolás	A (IV)	B	C	I_{abs}	szimm.	Besorolás (TED)
ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}	ν_i	I_{rel}		ν_i	ν_i	ν_i			
610	sh	624	m	620	m	$\nu_{15}; B_2$	619	598	589	22	B_2	C—N out + C=O out (ν_{16})
590	m; P			617	vw							
544	m; D	537	w			$2\times \nu_{12}; A_1$ $\nu_9 + \nu_{16}; B_2$ $\nu_{24}; B_1$	552	553	562	0,2	B_1	C=O def. (ν_{24})
		511	s	536 528 511 504 461	sh sh s s m		504	496	500	298	B_2	N—H out (ν_{15})
404	m	400	m			$\nu_{12} + \nu_{16}; B_1$	382	384	338	30	A_1	C=O def. (ν_9)
295	m, D					$\nu_9; A_1$	256	242	232	—	A_2	torzió (ν_{12})
173	w	163	s			$\nu_{12}; A_2$ $\nu_{16}; B_2$						
Raman; szilárd												
134	s											
117	m											
96	m											
69	m											
58	m											
52	s						63	54	51	0,1	B_2	torzió torzió (ν_{16})

* Az I, II, III és IV jelű oszlopokat a 16. ábrán ábrázoltuk.



13. ábra. A maleinimid síkban deformációs rezgéseinek mért és számított frekvenciái
Jelölés: l. a 11. ábrát



14. ábra. A maleinimid síkra merőleges deformációs rezgéseinek mért és számított frekvenciái Jelölés: l. a 11. ábrát

Ez a számítás közvetetten szintén a felhasznált gondolatmenet alkalmazhatóságát mutatja. Azt tudjuk meg az eredményből, milyen mértékben romlik a MIM-frekvenciák számításának pontossága (és mennyiben javult az U-frekvenciáké), ha az U kísérleti frekvenciáit is figyelembe vesszük.

A 19. és 20. táblázatban (B oszlop) és a 11–14. ábrákon (B sor) látható, hogy az U esetében javuló frekvenciaegyezéseket nem kíséri a MIM-frekvenciák egyezésének jelentékeny romlása. A négyzetes eltérés az U-frekvenciák esetében 22, illetve 28 cm^{-1} -ről (síkbeli, illetve síkra merőleges rezgések) 18, illetve 20 cm^{-1} -re javult, a MIM megfelelő értékei 13, illetve 17 cm^{-1} -ről 16, illetve 19 cm^{-1} -re romlottak.

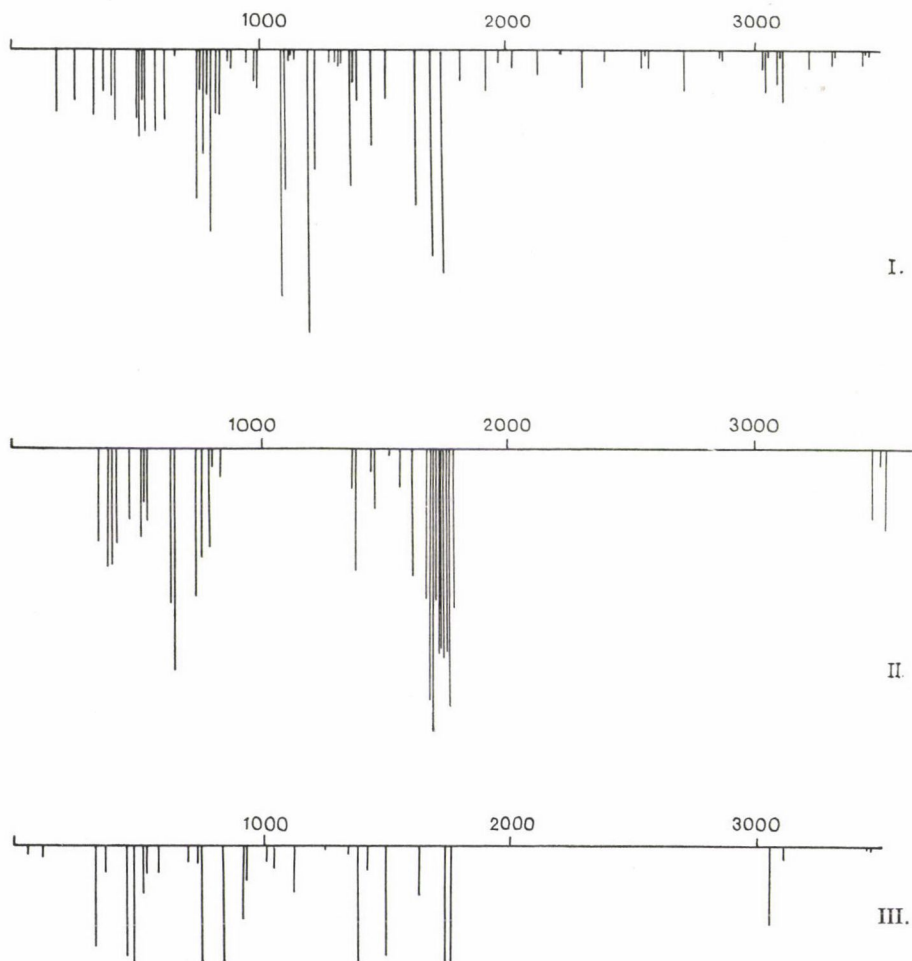
IV.2.6.4. Az uracil kísérleti színek alapján végzett független színeképszámítás eredménye

Az uracil CNDO-erőterével számított rezgési színeképet az uracil kísérleti színeképre [181] illesztve, a 19. táblázat C oszlopában, illetve a 11–12. ábrák C sorában bemutatott frekvenciaértékek adódtak.

A dolgozat egyik célja a színeképe minél pontosabb számítása volt: természetesen

a *C* oszlopban szereplő eredmények egyeznek legjobban a kísérleti frekvenciákkal. Az eredmények azonban alig jobbak a *B* oszlopénál (a síkrezgésekre a négyzetes eltérés 14 cm^{-1} -et, a síkra merőlegesekre 18 cm^{-1} -et ad, míg a *B* oszlopra rendre 18 és 20 cm^{-1} adódott).

Az uracil frekvenciáit (19. táblázat) a MIM-frekvenciáival (20. táblázat) összevetve a következő megállapítások tehetők. A C—H és N—H nyújtások azonos hullámszám-tartományba esnek, $3100\text{--}3000$, illetve $3500\text{--}3400\text{ cm}^{-1}$, utóbbiak a MIM esetében a magasabb tartományba tolódnak el. Ugyancsak a magasabb hullámszámok felé tolódik el a MIM C=O nyújtása az U-hoz képest ($1700\text{--}1780\text{ cm}^{-1}$ -es tartomány) ellentétben az $1580\text{--}1630\text{ cm}^{-1}$ tartományba eső C=C nyújtással, és a 900 cm^{-1} és 1320 cm^{-1} C—N nyújtásokkal, amelyek az U esetében nagyobbak.



15. ábra. Az uracil kísérleti és számított rezgési színeképe. A vonalak hossza intenzitásokkal arányos. Jelölés: vö. a 19. táblázattal

A nyújtási sávok a tapasztalat alapján várt tartományokba esnek, kiugró eltérést nem tapasztaltunk.

Ugyanez mondható el a síkban deformációs rezgésekről (hajlításokról): a megfelelő sávok azonos tartományba esnek, a $C=O$ deformációs rezgések kivételével az U frekvenciái a magasabbak. A gyűrű vázrezgéseinél nem várunk jó egyezést az eltérő gyűrűtagszám miatt: az észlelt különbség — majd 100 cm^{-1} — ezt alátámasztja. (MIM: $668; 639\text{ cm}^{-1}$; U : $588; 542\text{ cm}^{-1}$).

A síkra merőleges deformációk közül is jobban egyeznek az egyes atomok síkból történő kimozdulását leíró rezgési frekvenciák, mint a gyűrűvázat deformáló torziókat leíró frekvenciák.

A kísérleti és számított színeképeket, valamint az intenzitásvizonyokat a 15. ábra mutatja. I. a dióda-lézerrel felvett színeképet, II. az Ar mátrixban felvett színeképet mutatja, III. a számított színekép (C) ábrája (vö. 19. táblázattal).

IV.2.6.5. A skálafaktorok transzferálhatósága

Az A , B és C számításokhoz felhasznált skálafaktorokat a 21. táblázat mutatja. A nyújtásokhoz tartozó erőállandók skálafaktorainak egyezése igen jó; a síkbeli hajlítások értékei sem változnak számottevően, a gyűrűdeformációt kivéve. Az, hogy ez utóbbinak értéke változik, érthető is, hiszen az ötös és a hatos gyűrű vázrezgéseinek leírásához eltérő belső koordinátákat kellett felvenni (10. és 13. táblázat).

A síkbeli deformációknál az eltérő gyűrűtagszám kisebb szerepet játszik, mint a síkra merőleges rezgések esetében: ez megmutatkozik a skálafaktorok értékeinek nagyobb változásaiban is.

21. TÁBLÁZAT

A számítások során használt skálafaktorok értékei*

A belső koordináta típusa	A skálafaktorok értékei		
	A	B	C
Síkbeli koordináták			
$\nu(C-C)$	0,319	0,316	0,372
$\nu(C=C)$	0,384	0,391	0,404
$\nu(C-N)$	0,293	0,314	0,318
$\nu(C-H)$	0,445	0,445	0,447
$\nu(C=O)$	0,365	0,350	0,325
$\nu(N-H)$	0,459	0,457	0,456
$\alpha(\text{gyűrű})$	1,42	1,42	1,45
$\beta(C=O)$	1,02	1,02	1,03
$\beta(C-H)$	0,634	0,641	0,623
$\beta(N-H)$	1,16	1,15	1,14
Síkra merőleges koordináták			
τ	1,15	0,894	0,691
$\gamma(C-H)$	0,624	0,596	0,535
$\gamma(C=O)$	0,759	0,876	1,05
$\gamma(N-H)$	0,988	0,836	0,794

* A jelölés magyarázata a 10. táblázatban található.

Fentiek alapján elmondható, hogy a skálafaktorok hasonló molekulák sorozatán belül igen jól átvihetők egyik molekuláról a másikra; az átvihetőség jósága ciklikus vegyületeknél azokra a koordinátákra romlik csak, amelyeket az eltérő gyűrűtag-szám miatt másképpen kell definiálni.

A skálafaktorok átvihetőségét célszerű a széleskörűen alkalmazott erőállandó-transzferáláshoz hasonlítani. Előbbi esetben, amint láttuk, az adott molekulákra meghatározott skálafaktor-készletet használunk fel egy, a vizsgálat tárgyát képező molekulára végzett független számítás korrekciójára. Az utóbbi során irodalmi (általában normálkoordináta-analízissel a kísérleti színképből nyert) erőállandó-értékeket alkalmaznak a vizsgálandó vegyület erőterének becsléséhez, s ezt a becsült értéket illesztik a vizsgált vegyület kísérleti színképehez: a kérdéses vegyület erőállandói az illesztés eredményeképpen adódnak.

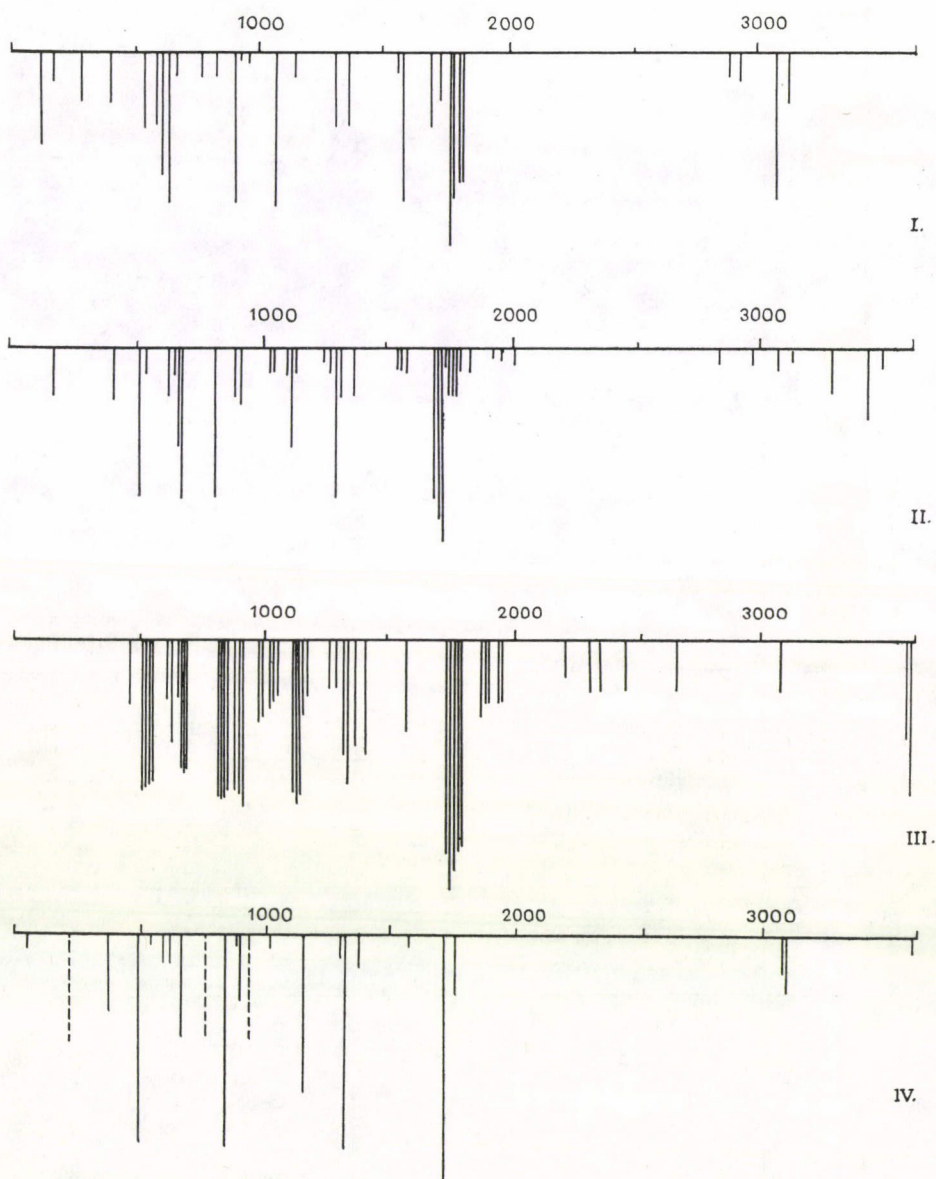
A normálkoordináta-analízissel nyert erőállandók relatív pontatlanságát az illesztéssel korrigált félempirikus számításokhoz képest már említettük — előbbiben az illesztés paramétere valamennyi erőállandó, míg utóbbiban mindössze néhány skálafaktor — az erőállandók transzferálásánál a hibák is transzferálódnak, s a vizsgált vegyület erőterében kumulálódnak. Különösen a kölcsönhatási erőállandók becsülhetők így nagy bizonytalansággal. Ezzel szemben a skálafaktorok transzferálása nem kumulálja a számítási pontatlanságokat. A független számítással nyert erőállandók korrekciója végig követhető, a számítás ellenőrizhető.

Amikor a MIM skálafaktorait változtatás nélkül alkalmaztuk az uracil CNDO-erőterére (11., 12. táblázat), megmutattuk, hogy a megfelelő diagonális erőállandók a MIM és az U esetében jól egyeznek, ugyanúgy, mint néhány kölcsönhatási erőállandó is (vö. 11., és 14., valamint a 12. és 15. táblázat megfelelő értékeit). A megbízható módszerrel nyert erőállandók az egyik molekuláról a másikra tehát ugyanolyan jól vihetők át (ha a belső koordináták definíciója azonos), mint a skálafaktorok — néhány koordináta esetében. Néhány kölcsönhatási tag (amely a vázrezgések és más típusú rezgések között lép fel) azonban különbözik, s ezek már nem lennének jól becsülhetők, ha nem állna rendelkezésre a két független erőállandó-számítás.

A skálafaktorok átvihetőségét alkalmazva megbízhatóbb eredményeket kapunk, mint az erőállandók átvihetőségének alapján. A számítás végig követhető és pontosabb.

IV.2.6.6. A maleinimid elméleti színképeinek számítása az uracil skálafaktorai segítségével. A maleinimid besorolásának módosítása

A skálafaktorok transzferálhatóságának végső ellenőrzésére visszaszámítottuk a MIM színképét az U skálafaktorai alapján (20. táblázat; C oszlop; 13., 14. ábra C sor). Igazolódik a feltevésünk: ha az uracil rezgéseinek kísérleti besorolása megfelelő, az uracilfrekvenciákra végzett illesztés eredményeképpen kapott skálafaktorok segítségével olyan pontos elméleti MIM-színkép számítható, hogy az alapján a MIM alaprezgései reálisan kiválaszthatók. A 20. táblázatban bemutatott számítási eredmények alapján a kísérleti besorolást [179] egyetlen helyen módosítottuk: véleményünk szerint a 1396 cm^{-1} -nél jelentkező, közepesen erős sáv B_1 szimmetriájú alaprezgés ($\nu(\text{C—N})$, $\beta(\text{N}_1\text{—H})$). Ezzel ellentétben a 1285 cm^{-1} -nél észlelt gyenge sáv kombinációs sáv: $1285 = 668 + 620 = 1288$, azaz $1285\text{ cm}^{-1} = \nu_{23} + \nu_{14}$, B_2 . Mindkét sáv (1396 és 1285 cm^{-1}) megjelenik mind az oldatról, mind a gózról készült infra-



16. ábra. A maleinimid kísérleti és számított rezgési színeképe. A vonalak hossza az intenzitásokkal arányos. Jelölés: vö. a 20. táblázattal

22. TÁBLÁZAT

A szilárd és gázfázisban felvett uracil-színképek összehasonlítása*

Kísérleti besorolás [104]	Susi—Ard 1971.		Dobos és mtsai 1979.		Nunziant—Cesaro 1980.		Elméleti besorolás (TED alapján)
	IR, nujol [104]	Raman szil. [104]	IR, nujol [87]	ATR—IR, szil. [87]	Mátrix [180]	Gőz [181]	
1. $\nu(\text{N—H})$ (fázisban)	3160 m	3130	3220 sh	3220 w	3510 vw	3450 vw	$\nu(\text{N}_1\text{—H})$
2. $\nu(\text{N—H})$ (ellentett fázisban)	3160 s	3130	3180 sh	3175 vw	3470 w	3427 w	$\nu(\text{N}_3\text{—H})$
3. $\nu(\text{C—H})$ (fázisban)	3100 s	3100	3100 vs	3115 s	—	3117 m	$\nu(\text{C}_5\text{—H})$
4. $\nu(\text{C—H})$ (ellentett fázisban)	3080 s	3085	3080 m	3087 sh	—	3076 m, w	$\nu(\text{C}_6\text{—H})$
5. $\nu(\text{C}_2=\text{O})$	1716 s	1662	1718 vs	1719 vs	1732 m	1734 vs	$\nu(\text{C}_2=\text{O})$
6. $\nu(\text{C}_4=\text{O}) + \nu(\text{C}=\text{C})$ (fázisban)	1675 s	1648	1674 vs	1677 vs	1693 s	1688 vs	$\nu(\text{C}_4=\text{O})$
7. $\nu(\text{C}_4=\text{O}) + \nu(\text{C}=\text{C})$ (ellentett fázisban)	1645 w	1644	1645 s	1650 sh	1616 m	1632 s	$\nu(\text{C}=\text{C})(+ \nu(\text{C}_4=\text{O}))$
8. $\beta(\text{N—H})$ (fázisban)	1508 m	1507	1510 m	1510 m	1525 vw	1517 m	$\beta(\text{N}_1\text{—H}) + \nu(\text{C}_2=\text{O}) +$ $\nu(\text{C}_6\text{—N}_1)$
9. $\nu(\text{gyűrű})$	1453 s	1463	1455 s	1455 s	1463 m	1460 m	$\beta(\text{N}_1\text{—H}) + \nu(\text{N}_3\text{—H}) +$ $+ \nu(\text{C—N})$
10. $\beta(\text{N—H})$ (ellentett fázisban)	1417 s	1422	1417 vs	1418 vs	1391 m	1396 m	$\nu(\text{C—N}) + \beta(\text{N}_1\text{—H})$
11. $\beta(\text{C—H})$ (fázisban)	1390 m	1398	1390 m, s	1390 m	1380 m, w	1380 m	$\beta(\text{N}_3\text{—H})$
12. $\beta(\text{C—H})$ (ellentett fázisban)	1217 s	—	1217 sh	1215 sh	—	1245 s	$\beta(\text{C—H})$ (fázisban)
13. $\nu(\text{gyűrű})$	1238 w	1236	1238 s	1237 vs	—	1106 m	$\beta(\text{C}_6\text{—H})(+ \nu(\text{C—N}))$
14. $\nu(\text{gyűrű})$	1099 w	1104	1099 w	1098 w	1099 w	1089 vs	$\alpha(\text{gyűrű})(+ \nu(\text{C}_6\text{—N}))$
15. $\nu(\text{gyűrű})$	1003 m	1010	1006 m	1004 w	1030	999 m	$\beta(\text{C}_5\text{—H})$
16. $\alpha(\text{gyűrű})$	993 m	988	994 m	993 w	990 w	946 m,w	$\nu(\text{C—C}) + \nu(\text{C—N})$
17. $\nu(\text{gyűrű})$	781 w	792	780 w	782 vw	764 w	780 s	$\nu(\text{C—C}) + \nu(\text{C—N}) + \alpha(\text{gyűrű})$
18. $\alpha(\text{gyűrű})$	585 m	597	584 m	585 w	—	588 m	$\alpha(\text{gyűrű})$
19. $\beta(\text{C}=\text{O})$ (fázisban)	565 m	558	564 m	566 m	550 w	551 m	$\alpha(\text{gyűrű})$
20. $\alpha(\text{gyűrű})$	550 s	540	545 s	547 s	537 w	527 m	$\beta(\text{C}=\text{O})$ (fázisban)
21. $\beta(\text{C}=\text{O})$ (ellentett fázisban)	—	398	—	—	390	377 m	$\beta(\text{C}=\text{O})$ (ellentett fázisban)

síkrezgések

síkra merőleges rezgések	1. $\gamma(\text{N—H})$	851 m	867	853 m	854 m	—	886 vw	$\gamma(\text{C}_6\text{—H}) + \gamma(\text{C}_5\text{—H})$
	2. $\gamma(\text{C—H})$	822 s	830	822 s	822 m	820 w	810 vs	$\gamma(\text{C}_4\text{=O})$
	3. $\gamma(\text{N—H})$	807 w	—	810 sh	804 w	807 w	769 s	$\gamma(\text{C}_2\text{=O})$
	4. $\gamma(\text{C—H})$	760 s	—	760 m	—	—	672 vw	$\gamma(\text{C}_5\text{—H}) + \gamma(\text{C}_6\text{—H})$
	5. $\tau(\text{gyűrű})$	782 vw	774	728 w	730 vw	—	542 m	$\gamma(\text{N}_1\text{—H}) + \gamma(\text{N}_3\text{—H})$
	6. $\tau(\text{gyűrű})$	530 s	531	531 sh	561 sh	—	440 sh	$\gamma(\text{N}_3\text{—H}) + \gamma(\text{N}_1\text{—H})$
	7. $\tau(\text{gyűrű})$	435 s	431	434 m, s	436 m, s	—	340 m	τ
	8. $\tau(\text{gyűrű})$	—	98	—	—	—	(120)	τ
	9. $\tau(\text{gyűrű})$	—	70	—	—	—	(70)	τ

* A jelölések magyarázata az 1. és a 10. táblázatban található.

vörös színekben: az általunk választott sáv az erősebb intenzitású. Így a 20. táblázatban feltüntetett, kísérleti, Woldbaek-féle besorolás [179] egyetlen alaprezgése változik meg, ez azonban két alaprezgés jelölését változtatja meg:

$$\nu_{19} \quad B_1 \quad 1396 \text{ cm}^{-1}$$

$$\nu_{20} \quad B_2 \quad 1322 \text{ cm}^{-1}.$$

Megjegyezzük még számításainkkal kapcsolatban, hogy — amint az a 13. ábrán látható — a MIM illesztése során három síkbeli rezgés szimmetriája felcserélődik: az összetartozó sávokat szaggatott vonal mutatja. A *B* és *C* számítások során a rezgések szimmetriája nem változik, ami szintén a skálafaktorok alkalmazhatósága mellett szól.

A MIM kísérleti és számított színeképeit, valamint az intenzitásvizonyokat a 16. ábrán mutatjuk be. Az infravörös színeképben szimmetriatiltott A_2 sávokat szaggatottal jelöltük (IV. görbe). I., II. és III. a különböző körülmények között felvett kísérleti színeképeket mutatja (vö. a 20. táblázattal), IV. a számított színeképet (20. táblázat, *A* oszlop).

IV.2.6.7. Az uracil szilárd és gázfázisú színeképének összehasonlítása

A szilárd és gázfázisú uracil színeképét a 22. táblázatban hasonlítottuk össze.

A táblázat bal oldalán a kísérleti, szilárd fázisú felvételeken alapuló besorolást [104] tüntettük fel, mellette kísérleti színeképek (szilárd mintákon végzett Raman [107], nujolos szuszpenziók infravörös [87, 104] és szilárd vékonyrétegben, belső reflexiós infravörös [89] színeképek) frekvenciáit soroltuk fel. A jobb oldalon láthatók az Ar-mátrixban [180] és gőzfázisban [181] készített infravörös színeképek alapfrekvenciái, mellettük a TED alapján kapott besorolás. A táblázat jobb és bal oldala mind a frekvenciaértékeket, mind a besorolást tekintve különbségeket mutat.

A szilárd fázis $\nu(\text{N—H})$ rezgési frekvenciája a kiterjedt hidrogénkötések miatt különbözik a gázfázis $\nu(\text{N—H})$ -jától: a $\nu(\text{N}_1\text{—H})$ értéke 3450 cm^{-1} , a $\nu(\text{N}_3\text{—H})$ -é 3427 cm^{-1} a gázfázisban, míg a szilárd fázisban ugyanezek több mint 200 cm^{-1} -el alacsonyabb hullámszámnál jelentkeznek (22. táblázat).

Megjegyezzük, hogy Woldbaek hivatkozott közleményében [179] a maleinimid szabad N—H és hidrogénkötésben levő N—H nyújtási frekvenciáira hasonlóan nagy arányú eltérést ad meg ($\nu(\text{N—H})_{\text{szabad}}^{\text{MIM}} = 3482 \text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{N—H})_{\text{H-kötés}}^{\text{MIM}} = 3200 \text{ cm}^{-1}$).

A hidrogénkötés egyik résztvevője a nitrogén hidrogénje, a másik az oxigénatom. A C=O nyújtási frekvenciák is változnak, s a nagyobb hullámszámok felé tolódnak el ($\nu(\text{C=O})_{\text{kötött}}^{\text{U}} = 1677\text{—}1719 \text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{C=O})_{\text{szabad}}^{\text{U}} = 1688\text{—}1734 \text{ cm}^{-1}$).

Ugyanez a frekvenciaeltolódás a MIM-nél még erőteljesebben jelentkezik ($\nu(\text{C=O})_{\text{kötött}}^{\text{MIM}} = 1710\text{—}1755 \text{ cm}^{-1}$; $\nu(\text{C=O})_{\text{szabad}}^{\text{MIM}} = 1756\text{—}1775 \text{ cm}^{-1}$).

A C—H nyújtási frekvenciák a szilárd és gázfázisban jól egyeznek. Minthogy a gázfázisra végzett számítás eredményeképpen az adódott, hogy az alacsonyabb frekvencia 97%-ban a $\text{C}_6\text{—H}$ nyújtáshoz, a magasabb 98%-ban a $\text{C}_5\text{—H}$ nyújtáshoz rendelhető, s a két deformáció nem jelentkezik egyszerre, a [104] besorolás is ily módon pontosítható lenne.

A C=C nyújtások frekvenciái nem különböznek számottevően ($1640\text{—}1650$ a szilárd fázisban, 1632 cm^{-1} a gázfázisban).



17. ábra. A kondenzált fázis, illetve a szabad állapot közti különbség, valamint a szublimáció illusztrálása (M. C. Escher: Liberation, 1955)

Ami a következő tartományt illeti ($\beta(\text{NH})$ és $\nu(\text{gyűrű})$ $1400\text{--}1500\text{ cm}^{-1}$ -ig), a kísérleti és elméleti besorolás különbözik, bár a frekvenciák értéke elég jól egyezik. Véleményünk szerint az 1510 cm^{-1} körüli sáv kevert rezgés (l. a 22. táblázatot), ugyanúgy a 1460 és 1396 cm^{-1} -es sávok, amelyekben a $\nu(\text{CN})$ részvétele ugyanakkora, mint a $\beta(\text{NH})$ -é. Az 1380 cm^{-1} körüli sáv véleményünk szerint $\beta(\text{N}_3\text{—H})$, a $\beta(\text{C—H})$ deformációk alacsonyabb frekvenciatartományban jelentkeznek.

A szilárd fázisban 1200 és 1300 cm^{-1} között két sávot sorolnak be alaprezgésnek, 1238 cm^{-1} körül egy vázrezgést, 1217 cm^{-1} $\beta(\text{CH})$ -t írva le. A gázfázisban csak 1245 cm^{-1} -nél jelentkezik egy $\beta(\text{CH})$ sáv, a vázrezgés csak 946 cm^{-1} -nél észlelhető. A legközelebb eső, 1106 cm^{-1} -es sávot $\beta(\text{C}_6\text{—H})$ -nak találtuk, amely $\nu(\text{C—N})$ rezgésekkel enyhén keveredik.

Az 1000 cm^{-1} körüli frekvencia besorolása $\beta(\text{C}_5\text{—H})$, míg utána két vázrezgés található ($946, 780\text{ cm}^{-1}$). A fennmaradó sávok megfeleltethetők egymásnak; szerintünk az utolsó két frekvencia, ν_{20} és ν_{21} tartozik $\beta(\text{C=O})$ -hoz, s az 551 cm^{-1} -nek megfelelő rezgési a szilárd fázisban (546 cm^{-1}) szintén átsorolandó gyűrűdeformáció.

A gőz és szilárd fázisban a síkra merőleges rezgések igen nagy eltérést mutatnak. A frekvenciák is jelentős mértékben különböznek, de értelmezésük még nagyobb különbséget mutat. A kísérleti besorolásban nem szerepelnek a $\gamma(\text{C=O})$ síkra merőleges deformációk, amelyek a gázfázisban 769 és 810 cm^{-1} -nél találhatók, és igen magasak a $\gamma(\text{N—H})$ frekvenciák értékei is. A $\gamma(\text{N—H})$ értékét 500 cm^{-1} körülire számítjuk: a MIM esetében ez 504 cm^{-1} (összehasonlításképpen: a pirrolra 414 cm^{-1} -et ad meg az irodalom [191]), az U-ra ezt 440 cm^{-1} -nek és 542 cm^{-1} -nek találtuk.



18. ábra. Illusztráció molekulák szilárd fázisban való kötöttségének bemutatására (M. C. Escher: Study of Regular Division of the Plane with Human Figures, 1944.)

Noha az Ar-mátrixban felvett színekép [180] néhány sávja hiányzik, a 22. táblázatból látszik, hogy a gőzszíneképpel egyezik meg: a mátrix is főleg izolált molekulákat tartalmaz, nincsenek benne asszociátumok.

Összefoglalva elmondható, hogy rezgési színeképe és geometriája alapján az uracil a szilárd fázisban és a gőzfázisban eltérő alakú. Kristályba rendeződve szerkezete módosul, hidrogénkötések alakulnak ki a molekulák között. A sávok nagymértékű eltolódása mutatja, hogy nagy szerepet kap a molekula környezete. A kristályba-rendeződés jól szemléltethető *Escher* rajzain (17—18. ábra). Hasonlóan ahhoz, ahogy ezeken a rajzokon a háromdimenziós alakok a finomabb vonásaikat elveszítve, a síkot kitöltve elhelyezkednek, úgy rendeződnek kristályba karakterisztikus atomtávolságaikat módosítva az uracil-molekulák is. S amint az ábrákon a síkban levő alakok mozgulatait a környezet szabja meg, a kristályban levő uracil geometriáját, reakciókészségét is környezete határozza meg, s a szabad molekulához képest módosítja.

V. AZ URACIL ÉS SZÁRMAZÉKAINAK FOTOKÉMIAI REAKTIVITÁSA

Az eddigiekben arról esett szó, hogy a kvantumkémiail módszer felhasználásával hogyan kaphatunk képet a fotodimerizációt befolyásoló körülményekről, a fotokémiai reakció során bekövetkező anyagi-minőségi változásokról, nem foglalkoztunk azonban magával a reakcióval.

Pirimidin bázisok rendezett állapotú molekuláinak fotodimerizációja gerjesztett szinglett állapoton keresztül koncertikus reakcióval megy végbe, s elsődlegesen *cis-syn* fotodimert eredményez [123, 130, 193]. Legkönnyebben a timin és az uracil gerjeszthető. Az azaauracilok gerjesztése nem ennyire tisztázott [194], noha a biológiai és fotobiológiai folyamatokban játszott szerepük miatt e vegyületekkel sokat foglalkoztak (pl. [195—197]). A kérdést elméletileg a monomer C(5)—C(6) kettőskötése erősségének elektrongerjesztés hatására bekövetkező változásával tárgyalták [198—200].

E fejezetben röviden azok az eredmények kerülnek ismertetésre, amelyeket egy, a fotokémiai viselkedést leíró, viszonylag egyszerű elméleti módszer [201] uracilra, 5- és 6-azauracilra (5A-U és 6A-U) történt alkalmazása során kaptunk. Az elméleti úton kapott fotokémiai reaktivitási sorrendet spektroszkópiail eredményekkel vetettük össze.

V.1. A módszer elve

A dimerizációs reakciók kvantumkémiail jellemzésére kiszámítandók a két molekula különböző elhelyezkedéséhez tartozó potenciálfelületek, s az energia hiperfelületén megkapható a reakció trajektóriája [11, 200].

A pirimidin bázisok fotodimerizációja azonban egyszerűbben is tárgyalható. Reakciókoordinátának tekinthető a C(5)—C(5') szénatomok közti távolság, s így a hiperfelületek energia profilokká (egyváltozós görbéké) egyszerűsödnek. A reakciókoordinátától függő energiagörbét úgy határoztuk meg, hogy a nagy távolságban elhelyezett molekulákat közelítettük egymáshoz, azaz a C(5)—C(5') távolságot fokozatosan csökkentettük, s az energiaértéket több pontban kiszámítottuk. Az energia

számítása módosított PPP π -elektronmódszerrel [201] történt. A Raksányi K. által készített perturbációs számítási eljárás részletei a [203] dolgozatban találhatók meg.

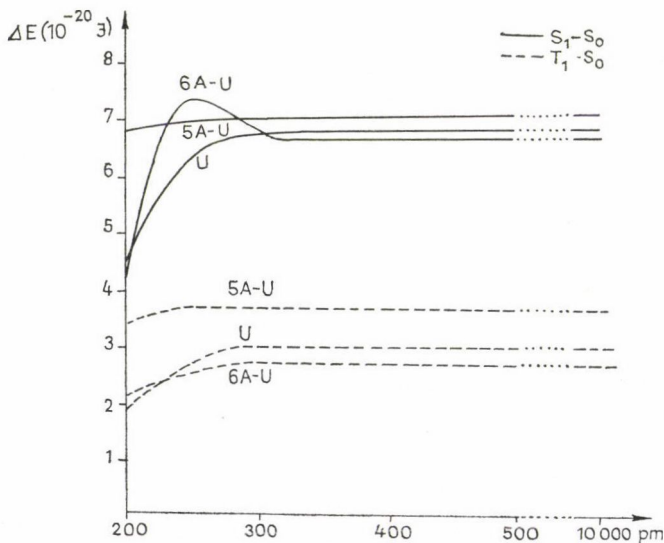
Kiinduláskor a két molekula síkja párhuzamosan, egymás fölött helyezkedett el, s a két sík által bezárt diéderes szög 26° volt. Ez az érték a dimerekre végzett CNDO/2 geometriaszámításból adódik. A röntgendiffrakcióval kapott 23° -tól [85] különbözik, mégis az előbbit választottuk, mert a számítás során a kristályban levő kölcsönhatásokat elhanyagoltuk (még a molekuláknak a kristály síkjából történő kimozdításához szükséges energiát sem vettük figyelembe).

A molekulák alapállapotának energiája nullad-, első- és másodrendű tagokból áll. Az elsőrendű tag, amely az atomtörzsek figyelembevételével kapható, Coulomb-féle és kölcsönhatási részre osztható. Másodrendű tagok oly módon nyerhetők, hogy valamennyi gerjesztett állapotot perturbációnak tekintik. E tagok polarizációs és töltésátmeneti részből állnak, aszerint, hogy a betöltetlen vagy betöltött molekulapályák ugyanahhoz a molekulához tartoznak vagy sem.

V.2. Az uracil és származékai fotokémiai reaktivitásának kvantumkémiai jellemzése

A 19. ábrán a legalacsonyabb gerjesztett szinglett (S_1) és tripllett (T_1) állapotok és az alapállapot (S_0) közötti energiakülönbséget ábrázoltuk a C(5)—C(5') távolság függvényében.

Az 5A-U S_1-S_0 görbéjén jól látható, hogy a molekulának nincs fotokémiai reaktivitása. Ezzel ellentétben az uracil energiagörbéjének kis molekulatávolságoknál bekövetkező hirtelen esése erős reakciókészséget mutat. A 6A-U esetében összetettebb a kép. Nagyobb távolságoknál nem mutat reaktivitást, de a kis molecula-



19. ábra. A legalsó gerjesztett állapotok (szinglett, S_1 és tripllett, T_1) energiája és az alapállapot (S_0) energiája közötti különbség ábrázolása az interplanáris molekulatávolság függvényében

23. TÁBLÁZAT

A Coulomb féle kicserélődési (C + Ex) valamint a töltésátmeneti és a polarizációs (CT + P) energiakorrekciós tagok értékei az alapállapotban (S_0) és az első gerjesztett állapotban (S_1) a molekulák közötti távolság (d) függvényében

d (pm)	S_0		S_1		
	C+Ex	CT+P	C+Ex	CT+P	
	(valamennyi 10^{-20} Joule)				
	Uracil				
200	42,29	−1,44	26,43	−30,60	−14,26
250	14,41	−0,48	8,97	−16,50	−0,16
300	5,13	−0,16	3,36	−15,22	1,12
∞	0	0	0	−16,34	—
	5-azauracil				
200	36,85	−6,25	24,83	−6,57	2,72
250	14,98	−1,44	7,85	−5,77	3,52
300	7,75	−0,64	2,56	−6,41	2,88
∞	0	0	0	−9,29	—
	6-azauracil				
200	27,56	−1,60	20,51	−24,03	−15,06
250	4,97	−0,16	12,98	−10,09	−1,12
300	2,56	−0,03	2,24	−9,45	−0,48
∞	0	0	0	−8,97	—

távolságokhoz tartozó görbealak — az energia gyors csökkenése — ennek ellenkezőjét tanúsítja.

A 23. táblázat azokat a járulékos tagokat tünteti fel, amelyek együttesen a 19. ábrán látható energiagörbék alakját szabják meg. Az alapállapot elsőrendű energiakorrekciói alapján az $U > 5A-U > 6A-U$ sorrendet lehetne felállítani. Ezt a sorrendet a CNDO/2 módszerrel számított dipólusmomentum-értékek is alátámasztották. Ugyanakkor azonban nem hagyhatók figyelmen kívül a másodrendű hatások. Alapállapotban ezek az 5A-U esetében a legerősebbek, az U és a 6A-U esetében elhanyagolhatók.

A gerjesztett állapotokat vizsgálva, feltűnő, hogy a 6A-U elsőrendű energiakorrekciója 250 pm-nél igen nagy érték ($12,98 \cdot 10^{-20}$ Joule) a másik két molekulához képest. Összevetve a 19. ábrával látható, hogy a 6A-U jellegzetes alakját ez a tag okozza. A gerjesztett állapot másodrendű energiakorrekciói közül kitűnik az 5A-U 200 pm-es molekulatávolsághoz tartozó energiaértéke ($6,57 \cdot 10^{-20}$ J). Az 5A-U kis reaktivitását ez okozza.

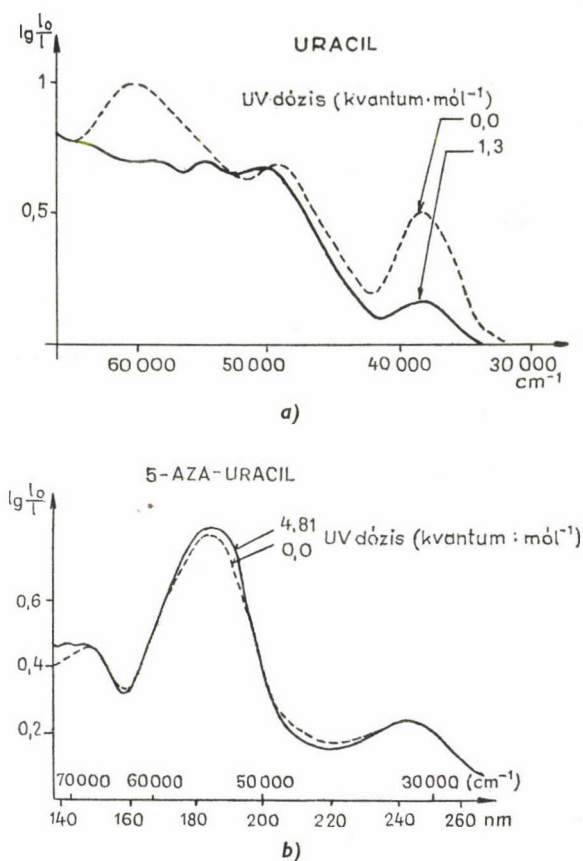
A 23. táblázat utolsó oszlopában azokat az értékeket tüntettük fel, amelyek a kis molekulatávolsághoz (200, 250, 300 pm) és a végtelen nagy molekulatávolsághoz tartozó energiák összehasonlítása során adódtak. Utóbbiak az ún. konfigurációs kölcsönhatási — CI — energiák. Az oszlopban különbségük szerepel.

Így igen jól látható az 5A-U rendellenes viselkedése: kis molekulatávolságoknál is csak pozitív értékeket ad, szemben a másik két molekulával. Ami azt jelenti, hogy két 5A-U molekula közelítésekor a kölcsönhatás nem növekszik.

A fotokémiai reaktivitás a gerjesztett állapot másodrendű energiakorrekciós tagjainak ismeretében megjósolható.

Emellett más kvantumkémiai jellemzők is alátámasztják ezt a sorrendet: az energiagörbék rövid távolságnál tapasztalható hirtelen esését részben okozó HOMO—LUMO mátrixelemek értékei ugyanezt mutatják. (200 pm-es molekulatávolságnál ennek értéke 5A-U-ra $3,68 \cdot 10^{-20}$ Joule, szemben az U-ra és 6A-U-ra vonatkozó $7,84 \cdot 10^{-20}$ Joule értékkel). Ez a kölcsönhatás okozza az ultraibolya színeképek első átmeneti sávjának aszimmetrikus felhasadását (uracil [204], timin [90] és 6A-U [205]), amely felhasadás mértéke igen kicsiny az 5A-U esetében [206].

Mindezek alapján az $U > 6A-U \gg 5A-U$ elméleti reaktivitási sorrend állítható fel. Ez a kísérleti értékekkel jól megegyezik [206], a 20. ábrán jól látható, hogy az 5A-U ultraibolya színekepe nagy sugárzási dózis hatására is alig változik, szemben az uracillal (l. még a [203] dolgozatot).



20. ábra. Uracil (a) és 5-azauracil (b) vékonyrétegének abszorpciós színeke a 254 nm-es UV fénnel történő besugárzás előtt (---) és után (—), a hullámszám függvényében [206]

ÖSSZEFOGLALÁS

E dolgozatban a pirimidin bázisok fotodimerizációjának infravörös spektroszkópiával történő vizsgálatához szükséges kiegészítő számítások kerültek bemutatásra. A CNDO/2 félempirikus kvantumkémiail módszerrel egyensúlyi geometriát és elméleti infravörös spektrumot számítottunk, a PPP-módszerrel reakcióutakat. A konkrét számítások az uracilra, illetve néhány uracilszármazékra vonatkoztak.

Megállapítást nyert, hogy a nitrogéntartalmú, konjugált hexaciklusok (piridin, pirimidin) rosszul modellezik a pirimidin bázisokat (így az uracilt is), mert utóbbiakban korlátozott a konjugáció, gyűrűikben jól definiált egyes- és kettőskötések találhatók.

Részletesen bemutattuk a piridin elméleti infravörös spektrumát, mert segítségével néhány, az irodalomban vitatott sáv besorolása egyértelműsíthető volt. Több vitás esetben egyik vagy másik szerző besorolását támasztottuk alá, míg — deuterizált piridinszármazékoknál — néhány alaprezgés besorolásának módosítására tettünk javaslatot.

A konjugált, nitrogéntartalmú hexaciklusokkal ellentétben geometriai paraméterei, valamint számított (nem illesztett) CNDO-erőállandói alapján az uracil jó modelljének a hasonló felépítésű, pentaciklusos maleinimid bizonyult.

Ugyanúgy, mint a piridin esetében, alkalmas illesztési eljárással, kísérleti spektruma alapján néhány paraméter segítségével a maleinimidre is illeszthető a kísérlettel jól egyező elméleti rezgési színekép. A számítási eljárás során a kötésviszonyokat jól tükröző, reális erőter kapható. Minthogy az illesztési paraméterek (skálafaktorok) az egyes belső koordinátákhoz kapcsolódtak, a maleinimid skálafaktorait a szerkezeti hasonlóság miatt az uracil infravörös színeképének számításához is felhasználtuk.

Az így kapott elméleti uracil-színekép a kísérleti színeképpel jól egyezett: lehetővé vált az uracil spektrumában megjelenő sávok besorolása.

Nemcsak a maleinimid skálafaktoraival számítottuk ki az uracil színeképét, hanem (azután, hogy az uracilt külön illesztettük az uracil-gőzről készült kísérleti spektrumhoz) — ellenőrzésképpen — az uracil skálafaktoraival a maleinimid színeképét is. Majd egy olyan számítást is végeztünk, amelynek során mindkét számított színeképet azonos faktorokkal illesztettük a kísérletekhez. A kapott frekvenciaértékek, valamint a skálafaktorok kis szórása azokat a korábbi tapasztalatokat igazolta, miszerint a skálafaktorok hasonló molekulák esetében egymásra átvihetők.

Összehasonlítottuk a gőzállapotú és kristályos uracil spektrumát, amelyből a fotokémiai reakciót befolyásoló körülményekre vontunk le következtetést.

Végül röviden bemutattuk, hogy mely kvantumkémiail jellemzőkkel jósolható meg a fotokémiai reaktivitás egyszerűbb esetekben.

Összefoglalva a dolgozat tudományos eredményeit, elmondható, hogy

1. alkalmas modellvegyületet találva a kísérleti spektrum nélkül is sikerült igen jól megjósolni az uracil rezgési színeképét és erőterét,
2. a számítás alapján sikerült a Római Egyetemen ezek után felvett színekép sávjait besorolni, s így a gázfázisú uracil-színeképét az irodalomban elsőként leírni és értelmezni,
3. a gázfázisú és szilárd fázisú spektrum különbözősége alapján azt a következtetést lehetett levonni, hogy a vékonyrétegben *in situ* vizsgált fotodimerizációt a topokémiai környezet nagymértékben befolyásolja,

4. a CNDO/2 erőmódszerrel és az alkalmazott skálázási eljárással mód nyílt a piridin, a maleinimid és az uracil molekulák erőterének az eddigiekénél (normálkoordináta-analízis) jóval pontosabb leírására,
5. a fotokémiai reaktivitást egyszerű elméleti energiaszámítások is jellemezhetik,
6. igazolódott az alkalmazott gondolatmenet, miszerint hasonló molekulák sorozatán belül az illesztéshez használt skálafaktorok egyik molekuláról a másikra átvihetők (a maleinimid skálafaktoraival számolt uracil spektrum jól egyezett az uracil kísérleti spektrumával). Tapasztalatunk szerint a megfelelő skálafaktorok transzferálhatósága az egyik molekuláról a másikra jobb, mint a kapcsolódó erőállandóké.

Az uracilra végzett számítások jelentősége túlmutat az egy molekulára kapott specifikus eredményeken. A függelékben bemutatott metil-szubsztituált pirimidin bázisok (1-Me, 3-Me, 1,3-diMe, 5-Me, 6-Me, 5, 6-diMe) számított geometriai paraméterei jól mutatják, hogy a szubsztituensek csak lokálisan éreztetik hatásukat, a gyűrű nagy részén a geometria, a kötésviszonyok, s így az erőviszonyok nem változnak az uracilhoz képest. Az erőterben csupán a szubsztitúcióhoz kapcsolódó néhány mátrixelem megváltoztatására (újbolí számítására) van szükség ahhoz, hogy — akár a közeljövőben — az erőter a molekulasorozat elemeire megkapható legyen, s a pirimidin bázisok rezgési szinképe méréstől függetlenül, előre is meghatározható legyen.

IRODALOM

1. C. L. Angell: J. Chem. Soc., 100, 504, 1961.
2. R. Gabillard: Vibrations et phénomènes de propagation, 2^e ed. Dunod, Paris, 1972.
3. L. D. Landau, J. M. Lifsic: Elméleti Fizika I, Tankönyvkiadó, Budapest, 1974.
4. H. Sayvetz: J. Chem. Phys., 7, 383, 1939.
5. G. Herzberg: Molekulaszinképek és molekulaszervezet, Akadémiai, Budapest, 1956.
6. E. B. Wilson, J. C. Decius, P. C. Cross: Molecular Vibrations, McGraw-Hill, New York, 1955.
7. G. G. Hall: Alkalmazott csoportelmélet, Műszaki, Budapest, 1975.
8. F. A. Cotton: Applications de la théorie des groupes à la chimie, Dunod Université, Paris, 1968.
9. H. Hammett: Group Theory and Its Applications to Physical Problems, Pergamon Press, 1962.
10. D. Steele: Theory of Vibrational Spectroscopy, AP, London, 1971.
11. Kapuy, E., Török, F.: Az atomok és molekulák kvantumelmélete, Akadémiai, Budapest, 1975.
12. M. Born, J. M. Oppenheimer: Ann. Physik, 84, 457, 1927.
13. D. R. Hartree: Proc. Cambr. Phil. Soc., 24, 89, 1928.
14. V. Fock: Z. Physik, 61, 126, 1930.
15. J. C. Slater: Phys. Rev., 35, 210, 1930.
16. C. C. J. Roothaan: Rev. Mod. Phys., 23, 69, 1950.
17. J. A. Pople, D. P. Santry, G. A. Segal: J. Chem. Phys., 43, 5129, 1965.
18. J. A. Pople, G. A. Segal: J. Chem. Phys., 44, 3289, 1966.
19. R. S. Mulliken: J. Chem. Phys., 36, 295, 1952.
20. P. Pulay: Mol. Phys., 17, 197, 1969.
21. P. Pulay: Mol. Phys., 18, 473, 1970.
22. P. Pulay: Mol. Phys., 21, 329, 1971.
23. P. Pulay: in Modern Theoretical Chemistry, H. F. Schaefer III. Ed., Plenum, New York, 1977.
24. J. A. Pople, D. L. Beveridge: Approximate Molecular Orbital Theory, McGraw-Hill, New York, 1970.
25. R. Fletcher, M. J. Powell: Comput. J., 6, 163, 1967.
26. R. Nalewajski, A. Golebiewski: Acta Phys. Pol., 49, 683, 1976.
27. R. Nalewajski: J. Mol. Struct., 40, 247, 1977.
28. P. Pulay: in Theoretical Chemistry, H. F. Schaefer Ed., Vol. 6., Acad. Publ., 1978.
29. J. W. McIver, A. Komornicki: J. Am. Chem. Soc., 94, 2625, 1973.
30. K. Kozmutza, P. Pulay: Theor. Chim. Acta, 37, 67, 1975.

31. R. H. Schwendemann: J. Chem. Phys., 44, 2115, 1966.
32. P. Pulay, G. Fogarasi, F. Pang, J. E. Boggs: J. Am. Chem. Soc., 101, 2550, 1979.
33. G. Fogarasi, P. Pulay: J. Mol. Struct., 39, 275, 1977.
34. G. Jalsovszky, P. Pulay: J. Mol. Struct., 26, 277, 1975.
35. F. Török, Á. Hegedűs, K. Kősa, P. Pulay: J. Mol. Struct., 32, 93, 1976.
36. P. Pulay, F. Török: Mol. Phys., 25, 1153, 1973.
37. Yu. Panchenko, P. Pulay, F. Török: J. Mol. Struct., 34, 283, 1976.
38. Császár P., Harsányi L.: Kém. Közl., 54, 213, 1980.
39. L. Harsányi, F. Kildár: J. Mol. Struct., 65, 141, 1980.
40. F. L. Gates: Science, 68, 479, 1928.
41. R. Beukers, W. Berends: Biochim. Biophys. Acta, 41, 550, 1960.
42. R. Beukers, J. Iljstra, W. Berends: Rec. Trav. Chim., 79, 101, 1960.
43. A. Wacker, H. Dellweg, D. Weinblum: Naturwiss., 47, 477, 1960.
44. S. Y. Wang: Nature, 188, 844, 1960.
45. A. D. McLaren, D. Shugar: Photochemistry of Proteins and Nucleic Acids, Pergamon, Oxford, 1964.
46. J. K. Setlow: in Current Topics in Radiation Research, Vol. 2., M. Ebert and A. Howard Eds, North Holland Publ., Amsterdam, 1966.
47. A. Wacker: in Progress in Nucleic Acid Research, Vol. 11, J. N. Davidson and W. E. Cohn Eds, AP, New York, 1963.
48. K. C. Smith: Radiation Res., Suppl. C. 54, 1966.
49. R. B. Setlow: Science, 153, 379, 1966.
50. R. B. Setlow: Progress in Nucleic Acid Research and Molecular Biology, 8, 257, 1968.
51. J. G. Burr: Advances in Photochemistry, 6, 193, 1968.
52. S. Y. Wang: Fed. Proc., 24, S—71, 1965.
53. E. Fahr: Angew. Chem. Intern. Ed., 8, 578, 1969.
54. H. L. Gunter, W. H. Prusoff: in Methods in Enzymology, 12A, L. Grossman and K. Moldave Eds, AP, New York, 1967.
55. S. Y. Wang: Photochemistry and Photobiology of Nucleic Acids, AP, New York, 1976.
56. R. L. Sinsheimer, R. Hastings: Science, 110, 525, 1949.
57. A. M. Moore, C. H. Thompson: Science, 122, 594, 1955.
58. A. M. Moore: Can. J. Chem., 36, 281, 1958.
59. S. Y. Wang: Nature, 190, 690, 1961.
60. S. Y. Wang: Photochem. Photobiol., 3, 395, 1964.
61. A. J. Varghese, S. Y. Wang: Biochim. Biophys. Res. Commun., 33, 102, 1968.
62. A. J. Varghese, S. Y. Wang: Science, 160, 186, 1968.
63. K. C. Smith: Photochem. Photobiol., 2, 503, 1963.
64. R. B. Setlow, W. L. Carrier, F. J. Bollum: Proc. Nat. Acad. Sci. U.S., 53, 1111, 1965.
65. K. H. Donges, E. Fahr: Z. Naturforschung, B21, 87, 1966.
66. G. H. Blackburn, R. J. H. Davies: Tetrahedron Lett, 37, 4471, 1966.
67. E. Fahr, G. Furst, R. Pastille: Z. Naturforsch., B23, 1387, 1968.
68. C. L. Greenstock, H. E. Johns: Biochim. Biophys. Res. Commun., 30, 21, 1968.
69. I. Rosenthal, D. Elad: Photochem. Photobiol., 8, 145, 1968.
70. A. J. Varghese: Biochemistry, 10, 4283, 1971.
71. A. J. Varghese: Photochem. Photobiol., 13, 357, 1971.
72. A. J. Varghese, C. S. Ruppert: Photochem. Photobiol., 13, 365, 1970.
73. A. J. Varghese, S. Y. Wang: Nature, 213, 909, 1967.
74. A. J. Varghese, M. H. Patrick: Nature, 223, 229, 1969.
75. A. J. Varghese: Biochim. Biophys. Res. Commun., 39, 543, 1970.
76. K. L. Wierzchowski, D. Shugar: Photochem. Photobiol., 1, 21, 1962.
77. M. Pearson, H. E. Johns: Mol. Biol., 20, 215, 1966.
78. A. J. Varghese: Biochemistry, 9, 4781, 1970.
79. G. L. Brown, J. T. Randall: Nature, 163, 209, 1949.
80. Y. Takenori, F. Hideo: Biopolymers, 6, 43, 1968.
81. V. A. Gumenyuk, B. I. Szuhorukov, V. G. Homenkó: Biofizika 21, 597, 1976.
82. J. Fidy, K. Raksányi: studia biophysica, 71, 137, 1978.
83. J. Fidy, I. Földvály, K. Raksányi: Acta Physiol. Hung., 52, 300, 1978.
84. R. F. Stewart, L. H. Jensen: Acta Cryst., 23, 1102, 1967.
85. E. Adaman, M. P. Gordon, L. H. Jensen: Chem. Commun., 1019, 1969.
86. I. L. Karle: Acta Cryst., 2521, 19, 1969.

87. S. Dobos, J. Fidy, Z. Laczkó: *Acta Chim. Hung.*, 106, 17, 1981.
88. S. Dobos, J. Fidy, Z. Laczkó: *Acta Chim. Hung.* (in press)
89. S. Dobos, J. Fidy, Z. Laczkó, L. Harsányi: *Acta Chim. Hung.* (in press)
90. B. G. Anex, A. F. Fucaloro, A. Dutta-Ahmed: *J. Phys. Chem.*, 79, 2636, 1975.
91. B. H. Jennings, S. Pastra, J. L. Wellington: *Photochem. Photobiol.*, 11, 215, 1970.
92. N. A. Szmorigo, B. A. Ivin: *Himija Geterociklicseszkizh Szojegyinyenyij*, 1, 105, 1975.
93. B. I. Szuhorukov, V. C. Ajkazjan, Ju. A. Jersov: *Biofizika*, 11, 753, 1966.
94. S. Nunziante-Cesaro: személyes közlés
95. R. C. Lord, G. J. Thomas jr.: *Spectrochimica Acta*, 23A, 2551, 1967.
96. I. Harada, R. C. Lord: *Spectrochimica Acta*, 26A, 2305, 1970.
97. G. Arie, E. da Silva, G. Dumas, H. Rozansza, C. Sebenne: *Biochimie*, 53, 1041, 1971.
98. Y. Nishimura, A. Y. Hirakawa, M. Tsuboi: in *Advances in Infrared and Raman Spectroscopy*, R. J. H. Clark és R. E. Hester Eds, London, 1978.
99. T. Shimanouchi, M. Tsuboi, Y. Kyogoku: in *Advances in Chemical Physics*, Vol. 7, Interscience, 1964.
100. M. Tsuboi, S. Takahashi, I. Harada: in *Physico-Chemical Properties of Nucleic Acids*, Vol. 2, J. Duchesne Ed, AP, New York, 1973.
101. E. Allenstein, W. Podszun, P. Kiemle, H. J. Mauk, E. Schlipf, J. Weidlein: *Spectrochimica Acta*, 32A, 777, 1976.
102. F. Milani-Nejad, H. D. Stidham: *Spectrochimica Acta*, 31A, 1433, 1976.
103. G. Sbrana, G. Adembri, S. Califano: *Spectrochimica Acta*, 22, 1831, 1966.
104. H. Susi, J. S. Ard: *Spectrochimica Acta*, 27A, 1549, 1971.
105. B. H. Jennings, S. Pastra-Landis, J. W. Lerman: *Photochem. Photobiol.*, 15, 479, 1972.
106. H. Susi, J. S. Ard, J. M. Purcell: *Spectrochimica Acta*, 29A, 725, 1973.
107. M. Tsuboi: in *XXIIIrd International Congress of Pure and Applied Chemistry*, Vol. 7, Butterworth, London, 1971.
108. J. D. Watson, F. H. C. Crick: *Nature*, 171, 964, 1953.
109. M. H. F. Wilkins: in *Biological Structure and Function*, Vol. 1, AP, London, 1961.
110. K. Hoogsteen: *Acta Cryst.*, 12, 822, 1963.
111. K. Hoogsteen: *Acta Cryst.*, 15, 907, 1963.
112. E. J. O'Brien: *J. Mol. Biol.*, 8, 89, 1964.
113. M. Spencer: *Acta Cryst.*, 12, 59, 1959.
114. T. Miles: *Biochemistry*, 54, 1104, 1964.
115. C. E. Bugg, J. M. Thomas, M. Sundarlingam, S. T. Rao: *Biopolymers*, 10, 175, 1971.
116. R. Gerdil: *Acta Cryst.*, 14, 333, 1961.
117. D. W. Green, F. S. Matthews, A. Rich: *J. Biol. Chem.*, 237, 3573, 1962.
118. S. Parry: *Acta Cryst.*, 7, 313, 1954.
119. D. L. Wulff, G. Frankel: *Biochim. Biophys. Acta*, 51, 332, 1961.
120. D. Weinblum: *Biochim. Biophys. Res. Commun.*, 27, 384, 1967.
121. N. Camerman, A. Camerman: *Science*, 160, 1451, 1968.
122. N. Camerman, A. Camerman: *J. Am. Chem. Soc.*, 92, 2523, 1970.
123. G. J. Fisher, H. E. Johns: *Photochem. Photobiol.*, 11, 429, 1970.
124. J. Konnert, J. W. Gibson, I. L. Karle, M. N. Khattak, S. Y. Wang: *Naure*, 227, 953, 1970.
125. B. Witkop: *Photochem. Photobiol.*, 7, 813, 1968.
126. S. Y. Wang, A. J. Varghese: *Biochim. Biophys. Res. Commun.*, 29, 543, 1967.
127. A. J. Varghese, S. Y. Wang: *Science*, 156, 955, 1967.
128. M. N. Khattak, S. Y. Wang: *Tetrahedron*, 28, 945, 1972.
129. L. M. Amzel, H. P. Avey, L. N. Becka, R. J. Poljak, M. N. Khattak, S. Y. Wang: *Nature New Biology*, 238, 204, 1972.
130. A. A. Lamola: *Photochem. Photobiol.*, 7, 619, 1968.
131. D. W. Whilens, H. E. Johns: *Photochem. Photobiol.*, 9, 323, 1969.
132. P. Wagner, D. Bucheck: *J. Am. Chem. Soc.*, 92, 181, 1970.
133. V. I. Danilov: *Photochem. Photobiol.*, 6, 233, 1967.
134. C. Nagata, Y. Imamura, M. Tagschira, M. Kodama, N. Fukuda: *J. Theoret. Biol.*, 9, 357, 1965.
135. R. Sayre, J. Harlos, R. Rein: *Molecular Orbital Studies in Chemical Pharmacology*, L. B. Kier Ed., Springer, New York, 1970.
136. K. N. Houk: in *Pericyclic Reactions*, Vol. 2, A. P. Marchand and R. E. Lehr Eds, (Org. Chem. A, Vol. 35—II.) AP, New York, 1977.
137. M. J. Mantione, B. Pullman: *Biochim. Biophys. Acta*, 91, 387, 1964.
138. B. Pullman, M. J. Mantione: *Biochim. Biophys. Acta*, 95, 668, 1965.

139. J. Bertrán: Theoret. Chim. Acta (Berl.), 25, 372, 1972.
140. J. Bertrán, O. Chalvet, R. Daudel, T. F. McKillop, G. H. Schmid: Tetrahedron, 26, 339, 1970.
141. R. Hoffman: J. Chem. Phys., 39, 1397, 1963.
142. F. Jordan, B. Pullman: Theoret. Chim. Acta (Berl.), 10, 423, 1968.
143. J. R. Einstein, J. L. Hessen, J. W. Longwerth, R. O. Rahn, C. H. Wei: Chem. Commun., 20, 1063, 1967.
144. V. I. Danyilov, V. A. Kuprijevic, O. V. Sramkó: Biofizika, 12, 186, 1967.
145. V. A. Kuprijevic, V. I. Danyilov, O. V. Sramkó: Tyeor. i Ekszperim. Him., 2, 6, 1966.
146. V. A. Kupriyevich: Int. J. Quant. Chem., 1, 561, 1967.
147. A. Imamura, H. Fujita, C. Nagata: Bull. Chem. Soc. Japan, 40, 21, 1967.
148. N. V. Zseltovszkij, V. I. Danyilov: Biofizika, 19, 784, 1974.
149. H. Berthod, C. Giessner-Prettre, A. Pullman: Int. J. Quant. Chem., 1, 123, 1967.
150. J. S. Kwiatkowski, B. Pullman: Adv. in Heterocyclic Chem., 18, 200, 1975.
151. A. Pullman, H. Berthod: Int. J. Quant. Chem., Quant. Biol. Symp., IV, 327, 1977.
152. J. S. Kwiatkowski, B. Pullman: Int. J. Quant. Chem., 4, 49, 1979.
153. V. I. Danilov, N. V. Zheltovsky: Theoret. Chim. Acta (Berl.), 19, 384, 1970.
154. M. Geller, A. Jaworski, A. Pohorille: Int. J. Quant. Chem., 15, 369, 1979.
155. O. L. Chapman, P. J. Nelson, R. W. King, D. J. Trecker, A. A. Griswold: Rec. Chem. Progr., 28, 167, 1967.
156. A. A. Lamola, J. P. Mittal: Science, 154, 1560, 1966.
157. R. B. Setlow, W. L. Carrier: J. Mol. Biol., 17, 23, 1966.
158. K. C. Smith: Photochem. Photobiol., 2, 503, 1963.
159. K. B. Freeman, P. V. Hariharan, H. E. Johns: J. Mol. Biol., 13, 833, 1965.
160. P. A. Swensen, R. B. Setlow: Photochem. Photobiol., 2, 419, 1963.
161. I. H. Brown, K. B. Freeman, H. E. Johns: J. Mol. Biol., 15, 640, 1966.
162. S. Nunziante-Cesaro személyes közlés.
163. B. Bak, L. Hansen—Nygaard, J. Rastrup—Andersen: J. Mol. Spectr., 2, 361, 1958.
164. D. A. Long, F. S. Murfin, E. L. Thomas: Trans. Farad. Soc., 59, 183, 1963.
165. J. C. Duinker, I. M. Mills: Spectrochim. Acta, 24A, 417, 1968.
166. D. H. Whiffen: Philos. Trans. R. Soc. London, 248A, 131, 1955.
167. J. R. Scherer, J. Overend: Spectrochim. Acta, 17, 719, 1961.
168. C. H. Kline, J. Turkevich: J. Chem. Phys., 12, 300, 1944.
169. L. Corrin, B. J. Fax, R. C. Lord: J. Chem. Phys., 21, 1170, 1953.
170. F. A. Andersen, B. Bak, S. Brodersen, J. Rastrup-Andersen: J. Chem. Phys., 23, 1047, 1955.
171. J. K. Wilmschurst, H. J. Bernstein: Can. J. Chem., 35, 1183, 1957.
172. M. A. Kovner, Ju. S. Korosztjeljev, V. I. Berezin: Opt. i. Spektr., 10, 457, 1961.
173. G. Zerbi, B. Crawford jr., J. Overend: J. Chem. Phys., 38, 127, 1963.
174. S. Suzuki, W. J. Orville-Thomas: J. Mol. Struct., 37, 321, 1977.
175. Vékey K.: TDK-dolgozat, ELTE Ált. és Szervetlen Kémiai Tanszék, Budapest, 1976.
176. Kilar F.: személyes közlés.
177. Mátyai Gy.: személyes közlés.
178. Vékey K.: Szakdolgozat, ELTE Ált. és Szervetlen Kémiai Tanszék, Budapest, 1977.
179. T. Woldbaek, P. Klaboe, J. C. Nielsen: J. Mol. Struct., 27, 283, 1975.
180. S. Nunziante-Cesaro, S. Dobos: személyes közlés.
181. S. Nunziante-Cesaro: személyes közlés.
182. S. Nunziante-Cesaro: személyes közlés.
183. J. Seres, G. Náray-Szabó, K. Daróczy-Csuha, I. Szilágyi, L. Párkányi, K. Simon: Tetrahedron, 37, 1565, 1981. alapján tett becslés.
184. M. J. Nowak, K. Szczepaniak, A. Barski, D. Shugar: Z. Naturforsch., C33, 876, 1978.
185. H. Fujita, I. Imamura, C. Nagata: Bull. Chem. Soc. Japan, 42, 1467, 1969.
186. R. Czerminski, B. Leysing, A. Pohorille: Int. J. Quant. Chem., 16, 605, 1979.
187. L. Harsányi, P. Császár: Acta Chim. Hung., 111, 351, 1982.
188. T. J. Zielinski, R. Rein: Int. J. Quant. Chem., 14, 851, 1978.
189. Császár P.: személyes közlés.
190. F. Török, Á. Hegedűs, P. Pulay: Theor. Chim. Acta (Berl.), 32, 145, 1973.
191. Iván B.: Szakdolgozat, ELTE Ált. és Szervetlen Kémiai Tanszék, Budapest, 1975.
192. C. N. R. Rao: Chemical Applications of IR Spectroscopy, AP, New York, 1963.
193. R. Lisewski, K. L. Wierzchowski: Mol. Photochem., 3, 231, 1971.
194. R. J. Balchunis: Dissert. Abstr. Int. Ed., 3, 36, 3953, 1976.
195. M. Jurovcik, S. Zadrazil, V. Fucik, Z. Sormova: Coll. Czech. Chem. Commun., 37, 299, 1972.

196. *L. Kittler, Z. Hradecna, H. E. Jacob, G. Loeber*: *Z. Allg. Mikrobiol.*, **5**, 323, 1975.
197. *F. Zadrazil, V. Fucik, M. Jurovcik, Z. Sormova*: *Coll. Czech. Chem. Commun.*, **37**, 309, 1972.
198. *V. I. Danyilov, Yu. A. Kruglyak, V. A. Kuprievich, V. V. Oglobin*: *Theoret. Chim. Acta*, **14**, 242, 1969.
199. *V. I. Danyilov*: *Dopov. Ak. Nauk UrSSR*, **A11**, 1021, 1975.
200. *V. I. Danyilov*: *Dopov. Ak. Nauk UrSSR*, **A12**, 61, 1976.
201. *K. Raksányi, J. Fidy, I. Földvári, L. Kittler*: *Biopolymers*, **17**, 887, 1978.
202. *Náray-Szabó G.*: *Alkalmazott kvantumkémia*, Műszaki, Budapest, 1979.
203. *K. Raksányi, P. Császár, L. Harsányi*: *J. Mol. Struct.*, **60**, 347, 1980.
204. *J. N. Brown, L. M. Trefonas, A. F. Fucaloro, A. Dutta-Ahmed*: *J. Phys. Chem.*, **79**, 2636, 1975.
205. *Fidy J.*: személyes közlés.
206. *Földvári I.*: személyes közlés.

FÜGGELÉK

F.1. TÁBLÁZAT

Kötésszögek összehasonlítása (fokokban)

Szögek*	Vegyületek**								
	U	1-Me-U	3-Me-U	5-Me-U	6-Me-U	1,3-diMe-U	5,6diMe-U	5-aza-U	6-aza-U
Gyűrű:									
C ₂ —N ₁ —C ₆	121,7	119,7	121,7	121,8	124,3	119,8	124,0	120,7	125,9
N ₃ —C ₂ —N ₁	114,9	116,2	116,1	114,3	115,0	116,9	114,3	113,4	114,5
C ₄ —N ₃ —C ₂	126,2	126,1	124,2	126,1	125,2	124,5	125,6	124,7	123,6
C ₅ —C ₄ —N ₃	115,5	115,0	116,6	117,2	115,5	116,2	117,1	119,3	114,2
C ₆ —C ₅ —C ₄	119,3	119,4	119,3	116,3	122,0	119,0	118,7	—	123,7
N ₁ —C ₆ —C ₅	122,4	123,5	122,0	124,2	118,0	123,5	120,3	126,3	—
C ₂ —N ₁ —H ₇	118,8	—	118,7	118,7	116,9	—	117,4	119,2	119,3
O ₈ —C ₂ —N ₁	121,9	121,5	120,9	122,1	121,5	120,8	122,2	122,4	121,3
H ₅ —N ₃ —C ₂	115,7	116,0	—	116,1	116,5	—	116,4	117,3	117,2
O ₁₀ —C ₄ —N ₃	118,0	118,1	117,8	117,3	117,8	117,4	117,0	119,0	119,0
H ₁₁ —C ₅ —C ₄	119,1	119,0	119,0	—	117,6	119,3	—	—	120,3
H ₁₂ —C ₆ —C ₅	123,8	122,6	123,9	122,8	—	122,7	—	119,2	—
C ₅ —N ₆ —C ₄								115,6	
N ₁ —N ₆ —C ₆									118,2
C _{Me1} —gyűrű		120,2	114,8	120,9	126,3	119,6	119,5		
C _{Me2} —gyűrű						116,6	125,0		
Szubsztituens:									
H ₁₃ —C _{Me1} —gyűrű		111,1	111,0	113,3	113,0	111,0	113,1		
H ₁₄ —C _{Me1} —gyűrű		111,7	111,7	112,2	111,2	111,8	112,6		
H ₁₅ —C _{Me1} —gyűrű		111,7	111,7	112,2	111,2	111,8	112,6		
H ₁₃ —C _{Me1} —H ₁₄		107,4	107,5	106,4	107,3	107,5	106,1		
H ₁₃ —C _{Me1} —H ₁₅		107,4	107,5	106,4	107,3	107,5	106,1		
H ₁₆ —C _{Me2} —gyűrű						110,8	113,4		
H ₁₇ —C _{Me2} —gyűrű						111,9	111,1		
H ₁₈ —C _{Me2} —gyűrű						111,9	111,1		
H ₁₆ —C _{Me2} —H ₁₇						107,5	107,2		
H ₁₆ —C _{Me2} —H ₁₈						107,5	107,2		

* A számok az F.1.—F.8. ábra atomindexeire vonatkoznak.

** Jelölés: Me = metil; diMe = dimetil; U = uracil.

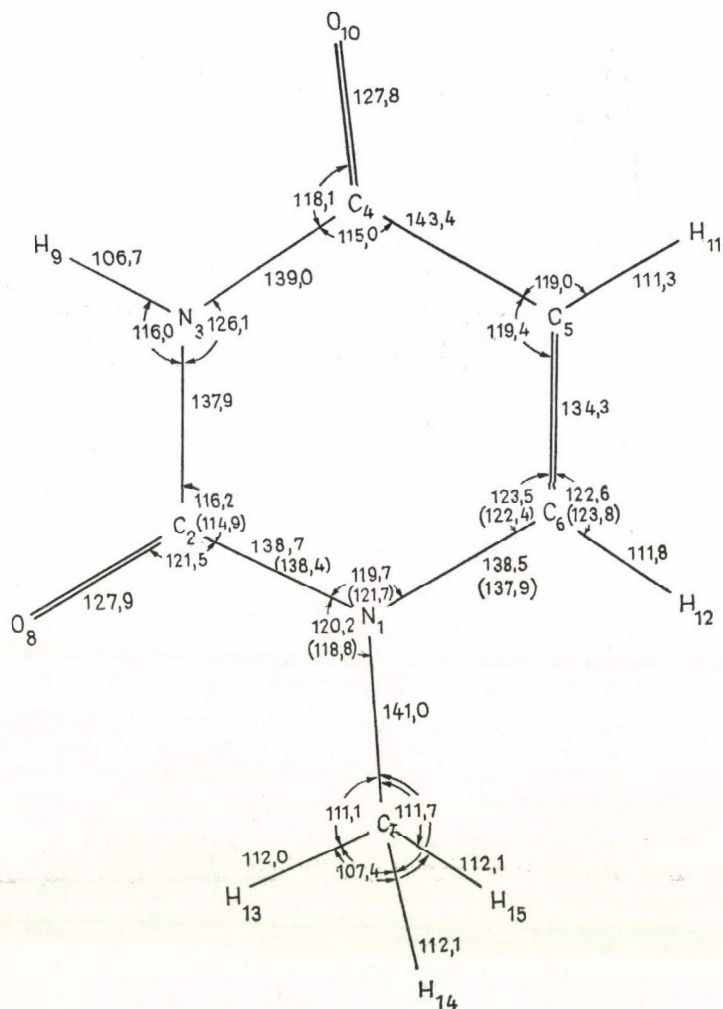
F.2. TÁBLÁZAT

Kötéshosszak összehasonlítása (pm)

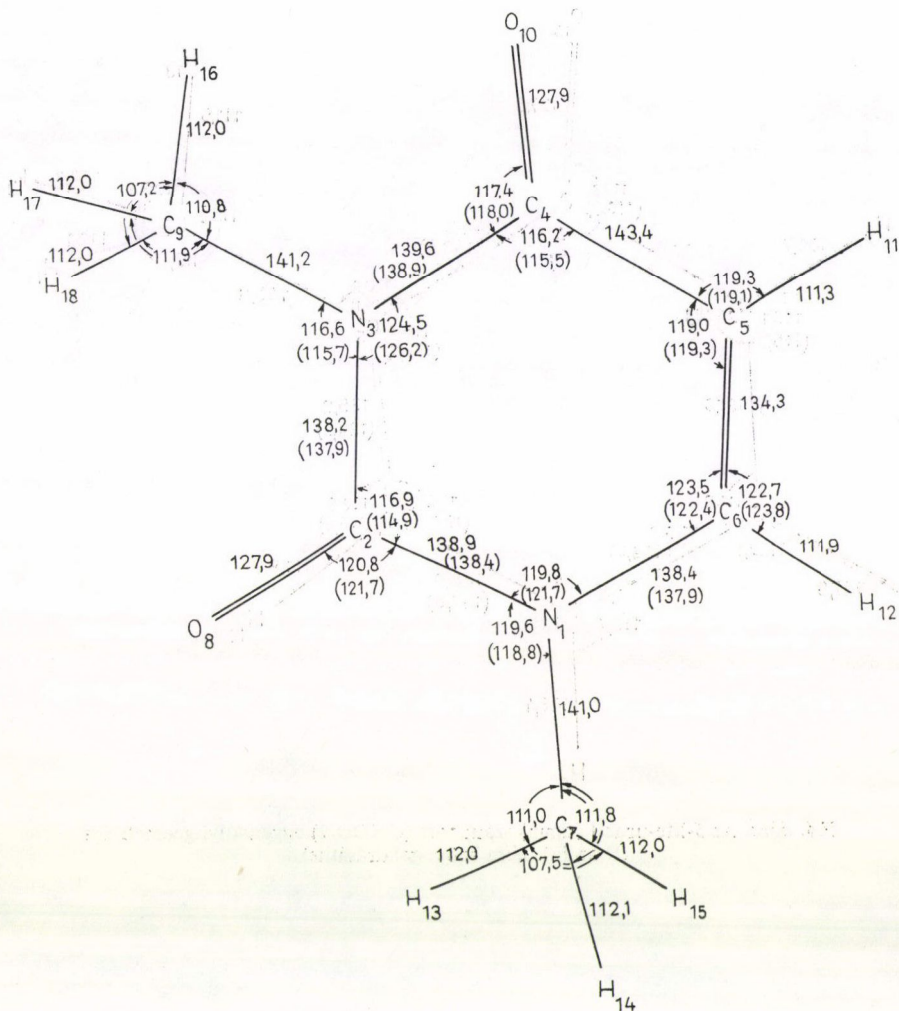
Kötéstípus*	Vegvületek**								
	U	1-Me-U	3-Me-U	5-Me-U	6-Me-U	1,3-diMe-U	5,6-diMe-U	5-aza-U	6-aza-U
Gyűrű:									
N ₁ —C ₂	138,4	138,7	138,5	138,2	138,4	138,9	138,2	138,4	138,2
C ₂ —N ₃	137,9	137,9	138,2	137,8	137,7	138,2	137,6	137,5	137,3
N ₃ —C ₄	138,9	139,0	139,5	139,0	139,1	139,6	139,0	138,9	138,6
C ₄ —C ₅	143,5	143,4	143,5	144,3	143,1	143,4	144,0	138,7	143,2
C ₅ —C ₆	134,3	134,3	134,3	135,2	135,6	134,3	136,6	130,5	130,4
N ₁ —C ₆	137,9	138,5	137,9	138,0	139,1	138,4	139,0	136,9	131,0
N ₁ —H ₇	106,4	—	106,5	106,4	106,6	—	106,5	106,5	106,8
C ₂ —O ₈	127,8	127,9	127,9	127,9	127,9	127,9	127,9	127,7	127,8
N ₃ —H ₉	106,7	106,7	—	106,7	106,6	—	106,6	106,5	106,7
C ₄ —O ₁₀	127,8	127,8	127,9	127,8	127,9	127,9	127,9	127,4	127,9
C ₆ —H ₁₁	111,2	111,3	111,3	—	111,4	111,3	—	—	111,2
C ₆ —H ₁₂	117,7	111,8	111,7	111,9	—	111,9	—	111,9	—
C _{gyűrű} —C _{Me}	—	—	—	145,8	145,3	—	145,9	—	—
N _{gyűrű} —C _{Me}	—	141,0	141,2	—	—	141,0	145,5	—	—
Szubsztituens:									
C _{Me} —H _{Me}									
C _{Me1} —H ₁₃		112,0	112,0	111,9	111,8	112,0	112,0		
C _{Me1} —H ₁₄		112,1	112,1	112,1	112,0	112,1	112,2		
C _{Me1} —H ₁₅		112,1	112,1	112,1	112,0	112,0	112,2		
C _{Me2} —H ₁₆						112,0	111,9		
C _{Me2} —H ₁₇						112,0	112,0		
C _{Me2} —H ₁₈						112,0	112,0		

* A számok az F.1.—F.8. ábra atomindexeire vonatkoznak.

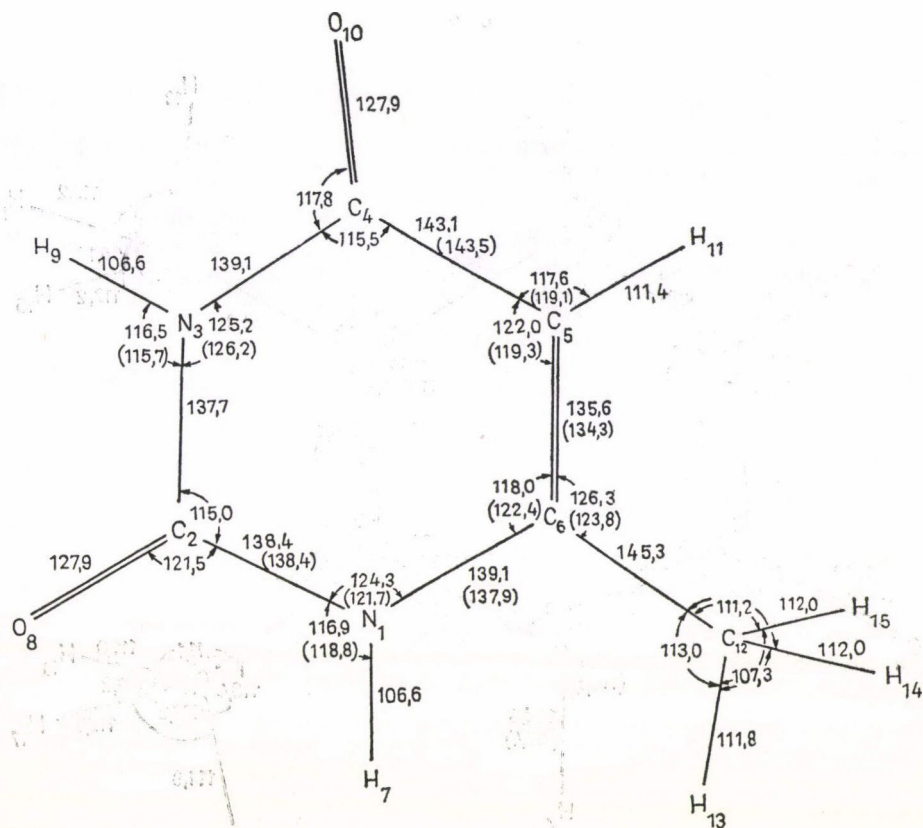
** Jelölés: Me = metil; diMe = dimetil; U = uracil.



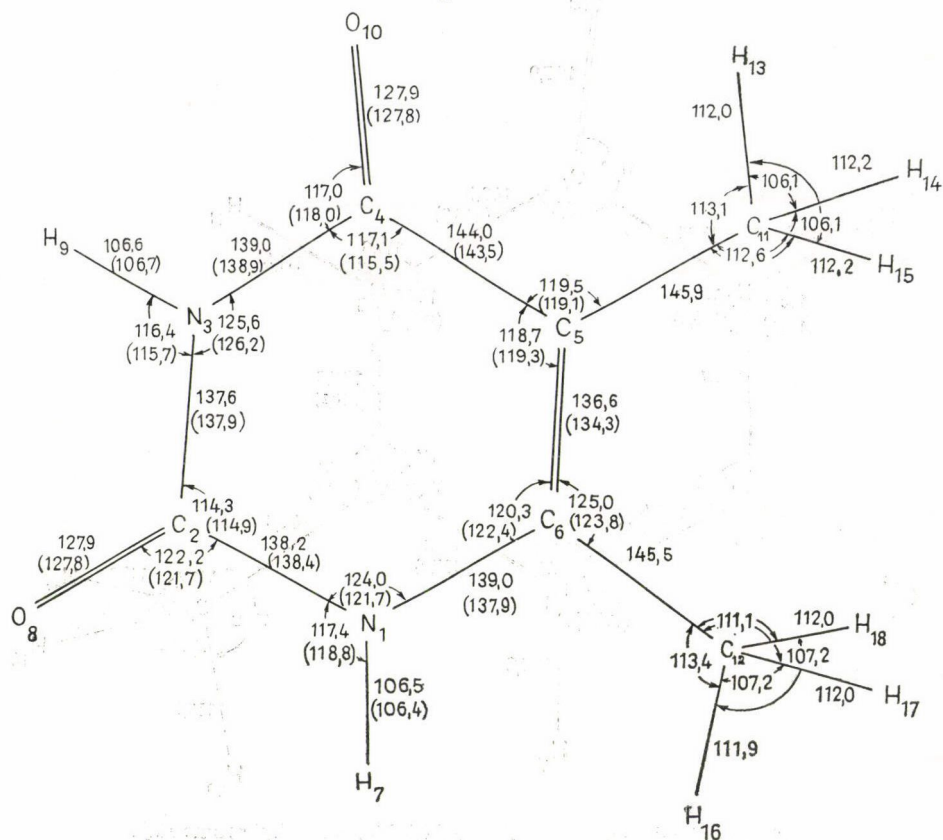
F.1. ábra. Az 1-Me-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája (szögek fokokban, távolságok pm-ben). A zárójelben szereplő számok az uracil (9/a ábra) számított értékei. Az uracilértékeket egyezés esetén nem tüntettük fel



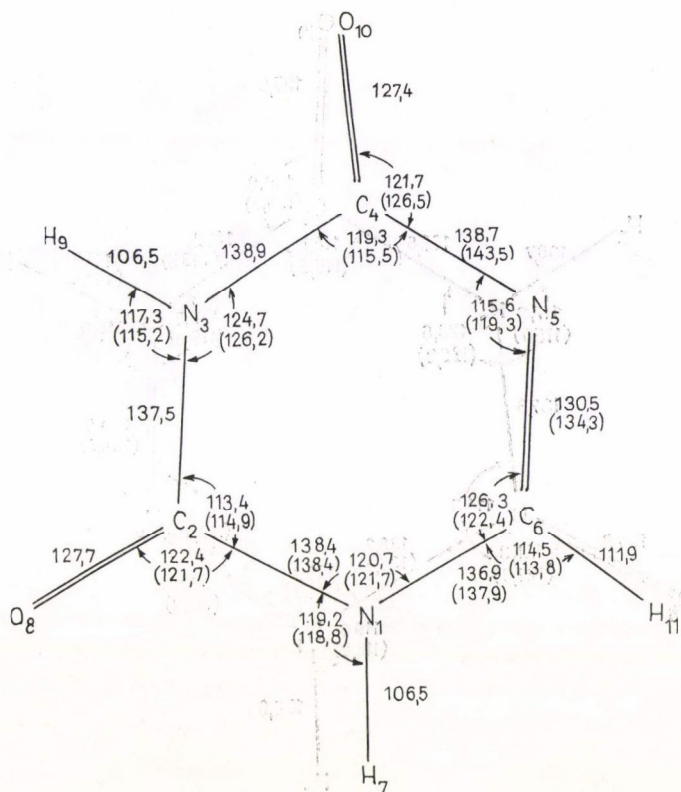
F.3. ábra. Az 1,3-di-Me-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája (l. az F.1. ábra szövegaláírását is)



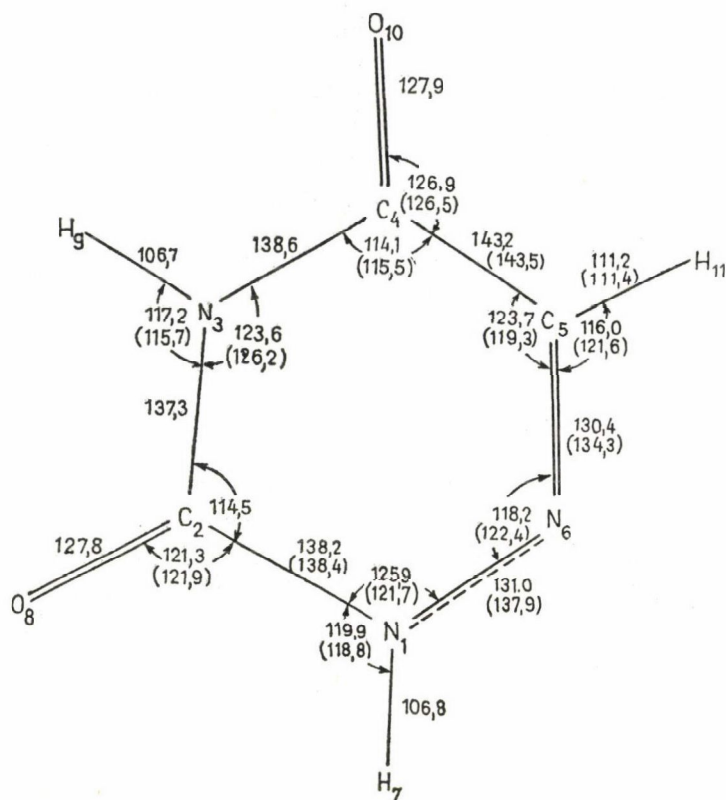
F.5. ábra. A 6-Me-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája (l. az F.1. ábra szövegálírását is)



F.6. ábra. Az 5,6-diMe-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája (l. az F.1. ábra szövegálírását is)



F.7. ábra. Az 5-aza-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája (l. az F.1. ábra szövegálírását is)



F.8. ábra. A 6-aza-uracil számított (CNDO/2) egyensúlyi geometriája
(l. az F.1. ábra szövegáírását is)

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó és Nyomda főigazgatója
Műszaki szerkesztő: Sándor István
A kézirat a nyomdába érkezett: 1983. július 8. — Terjedelem: 8,4 (A/5) ív
84-522 — Szegedi Nyomda, Szeged — F. v.: Dobó József igazgató

Ára: 15 Ft
Előfizetés kötetenként: 90 Ft

INDEX: 26 491 ISSN 0025—0104

TARTALOMJEGYZÉK

<i>Harsányi László</i> : Pirimidin bázisok egyensúlyi geometriájának, erőterének és infravörös szinképének számítása a CNDO/2 erőműdszerrel	485
---	-----

TÁRGYMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 31. kötetéhez

<i>Bergou János</i> : Elektrodinamika lézerterekben	1
<i>Siklós Tivadar</i> : Rend-Rendezetlenség, alagutazás és fononok a ferroelektromos fázisátalakulások dinamikai modelljében	75
<i>Beke Dezső</i> : ^{65}Zn diffúziója híg alumínium ötvözetekben	93
<i>Szépfasusyné Menyhárd Nóra</i> : Kvázi-egydimenziós vezetők elmélete	171
<i>Nagy Károly, Tél Tamás</i> : Elektromágneses hullámok anizotrop közegekben	239
<i>Apagy Barnabás</i> : A magszerkezet szerepe többnukleont átadó magreakciókban	273
<i>Zsoldos Lehel</i> : Deformációeloszlás meghatározása egykristály hordozók felületi rétegében a röntgen reflexiós görbe alapján	337
<i>Kovács István és Szenes György</i> : Sugárzási károsodás fémekben	357
<i>Varró Sándor</i> : Szabad elektronok és intenzív fény kölcsönhatásának elméleti vizsgálata	399
<i>Szőkefalvi-Nagy Zoltán</i> : Magnomatékok mérése, belső mágneses terek vizsgálata Coulomb-gerjesztéssel	457
<i>Parragh Levente</i> : A kétfajta leptontöltéshez vezető tér vizsgálata	503
<i>Lendvay Ödön</i> : Vegyületfélvezetők	509

Könyvismertetések

<i>Ehlers J., Hepp K., Kipperhahn R., Weidenmüller H. A., Zittartz J.</i> (ed.-s): Topics in Nuclear Physics I—II	85
<i>Hsiang W. Y., Kobayashi S., Singer I. M., Weinstein A., Wolf J., Wu H. H.</i> : The Chern Symposium 1979	85
<i>Kevorkian J. and Cole J. D.</i> : Perturbation Method in Applied Mathematics	86
<i>Doebner H. D.</i> (editor): Differential Geometric Methods in Mathematical Physics	86
<i>Metz K. and Engl W. L.</i> : Elektromagnische Felder	87
<i>Mc Kellar A. R. W., Oka T., Stoicheff B. P.</i> (ed.-s): Laser Spectroscopy V.	87
<i>Vainshtein Boris K.</i> : Modern Crystallography I.	88
<i>Haken H.</i> (ed.): Chaos and Order in Nature	89
<i>Della Dora J., Demongeot J., Lacolle B.</i> (ed.-s): Numerical Methods in the Study of Critical Phenomena	89
<i>Güntheroth H. J., Beck H.</i> : Glassy Metals I.	90
<i>Enoch J. M., Tobey F. L. Jr.</i> (ed.-s): Vertebrate Photoreceptor Optics	91
<i>J. M. Gvishiani</i> (ed.): Science, Technology and the Future	167
<i>E. Krause</i> (ed.): Advances in Fluid Mechanics	168
<i>Benjamin Gal-Or</i> : Cosmology, Physics and Philosophy	168
<i>S. T. Fraser, N. Lawrence, D. Park</i> (ed.-s): The sturdy of Time IV	169
<i>François Thomasset</i> : Implementation of Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations	169
<i>Norbert Straumann</i> : Allgemeine Relativitätstheorie und relativische Astrophysik	170
<i>G. Gräff, E. Klempf and G. Werth</i> (ed.-s): Recent Status and Aims of Quantum Electrodynamics	170
<i>M. Schulz, G. Pensl</i> : Insulating Films on Semiconductors	251
<i>E. Pietronero, E. Tosatti</i> (editors): Physics of Intercalation Compounds	253
<i>Landolt—Börnstein</i> : Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles	253
<i>Neutron Radiography Handbook</i>	254
<i>D. Berényi and G. Hock</i> (editors): High-Energy Ion-Atom Collisions	254
<i>A. Benninghoven, J. Giber, J. László, M. Riedel, M. W. Werner</i> (editors): Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS III	255

<i>C. Vidal, A. Pacault</i> (editors): Nonlinear Phenomena in Chemical Dynamics	256
<i>Landolt—Börnstein</i> : Numerical Data and Relationships in Science and Technology	257
<i>G. Marx</i> (ed.): Nuclear Physics, Nuclear Power. GIREP Seminar on the Teaching of Physics in Schools	257
<i>I. Lindgren and J. Morrison</i> : Atomic Many-Body Theory	258
<i>Szépfaalusi Péter és Tél Tamás</i> (szerk.): A KÁOSZ	259
<i>Jagdish Mehra and Helmut Reichenberg</i> : The Historical Development of Quantum Theory ...	260
<i>L. Brekhovskikh—Yu. Lysanov</i> : Fundamentals of Ocean Acoustics	261
<i>Landolt—Börnstein, Group III., 15a</i> : Metals: Electronic Transport Phenomena	263
<i>Bisztray-Balku Sándor, Bozóky László és Koblinger László</i> : A sugárvédelem fejlődése Magyarországon	263
<i>Mendel Sachs</i> : General Relativity and Matter	264
<i>Schäfer S. P.</i> (ed.) Picosecond Phenomena III	265
<i>Brederlow—Fill—Witte</i> : The High Power Jodine Laser	266
<i>Ya. G. Sinai</i> : Theory of Phase Transitions, Rigorous Result	266
<i>T. Matsubara</i> (ed.): Structure and Properties of Matter	267
<i>Tarján Imre</i> (szerk.): A biofizika alapjai	268
<i>H. Ryssel és H. Glawisching</i> (ed.-s): Ion Implantation Techniques	269
<i>M. Cardona és G. Güntherodt</i> (ed.-s): Light Scattering in Solids III. Recent Results	270
<i>R. G. Newton</i> : Scattering Theory of Waves and Particles	270
<i>Maple M. B. és Fisher O.</i> (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds I.	271
<i>Maple M. B. és Fisher O.</i> (ed.-s): Superconductivity in Ternary Compounds II.	271
<i>Sharma—Halme—Butuzov</i> : Optical Fiber Systems and Their Components	355
<i>Orestes N. Stavroudis</i> : Modular Optical Design	355
<i>M. Cardona and G. Güntherodt</i> (editors): Light Scattering in Solids II.	356
<i>P. W. Hawkes</i> (ed.): Magnetic Electron Lenses	355
Resonances in Heavy Ion Reactions	355
<i>Ja. B. Zeldovics</i> : A vákuum elmélete lehet, hogy megoldja a kozmikus talányt	356
<i>R. C. Whitten</i> (ed.): The Atmospheric Aerosol Layer	357
<i>James Glimm, Arthur Jaffe</i> : Quantum Physics	357
<i>Peter Bruesch</i> : Phonons: Theory and Experiments I.	358
Dynamic of Nuclear Fission and Related Collective Phenomena	359
<i>Pradip Niyogi</i> : Integral Equation Method in Transonic Flow	359
<i>F. H. Schröder</i> (ed.): Stability in the Mechanics of Continua	340
<i>David L. Book</i> (ed.): Finite-Difference Techniques for Vektorized Fluid Dynamic	341
<i>Demetri P. Telonis</i> : Unsteady Viscous Flows	341
<i>Robert G. Hunsperger</i> : Integrated Optics: Theory and Technology.	342
<i>A. Ambrózy</i> : Electronic Noise	342
<i>B. K. Vainshtein, V. M. Fridkin, V. L. Indenbom</i> : Modern Crystallography II. Structure of Crystals	343
<i>I. A. Kunin</i> : Elastic Media with Microstructure I. One-Dimensional Models	344
<i>T. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen</i> (ed.-s): Real—Space Renormalization	344
<i>G. Benedek, U. Valbusa</i> (ed.-s): Dynamic of Gas—Surface Interaction	345
<i>W. H. Marlow</i> (ed.): Aerosol Microphysics II. Chemical Physics of Microparticles	346
<i>Charles A. Weatherford and Herbert W. Jones</i> (ed.): ETO Multicenter Molecular Integrals ...	347
<i>G. Höhler</i> (ed.) <i>Landolt—Börnstein New Series I/9/b/2</i> : Elastic and Charge Exchange Scattering of Elementary Particles method and Results of Phenomogical Analyses	348
<i>Landolt—Börnstein: II/14a</i> : Molekuláris állandók	349
<i>Landolt—Börnstein</i> : Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series, Group III. Column 12, Subvolume b: Phonon States of Alloys—Electron States and Fermi Surfaces of Strained Elements	349
<i>Landolt—Börnstein: Group III, 17b</i> : Physics of II—VI I—VII compounds, Semimagnetic Semiconductors	550
<i>K. H. Bennemann—F. Brouers—D. Quitmann</i> : Ionic Liquids, Molten Salts and Polyelectrolytes	550
<i>U. Nigul and J. Engelbrecht</i> : Nonlinear Deformation Waves	551
<i>L. J. S. Bradbury—F. Durst—B. E. Launder—F. W. Schmidt—J. H. Whitelaw</i> : Turbulent Shear Flows	552
<i>J. Pedlovsky</i> : Geophysical Fluid Dynamics	552
<i>H. H. Fernholz and E. Krause</i> : Three—Dimensional Turbulent Boundary Layers	553
<i>E. Krause</i> : Proceedings of the Eight International Conference of Numerical Methods in Fluid Dynamics	553
<i>Roger Peyret and Thomas D. Taylor</i> : Computational Methods for Fluid Flow	554
<i>Gerhard Fieck</i> : Symmetry of Polycentric Systems	554

<i>S. Ezekiel and H. J. Arditty: Fiber-Optic Rotation Sensors and related Technologies</i>	555
<i>G. Ludwig: Foundation of Quantum Mechanics I.</i>	555
<i>Jagdish Mehra—Helmuth Rechenberg: The Historical Development of Quantum Theory</i>	556
<i>A. J. Lichtenberg—M. A. Lieberman: Regular and Stochastic Motion</i>	556
<i>R. M. White: Quantum Theory of Magnetism</i>	557
<i>Imre László: Hőátvitel összetett szerkezetekben</i>	558
<i>R. Brunetaud, D. Coutouradis, T. B. Gibbons, Y. Lindblom, D. B. Meadowcroft, R. Stickler:</i> <i>High Temperature Alloys for Gas Turbines 1982</i>	559
<i>Tóth Árpád: A lakosság természetes sugárterhelése</i>	560
<i>Földiák Gábor és Stenger Vilmos: Kísérleti és ipar gammabesugárzó berendezések és alkalmazásuk</i>	560
<i>H. Fritzsch: Quarks</i>	561

NÉVMUTATÓ

a Magyar Fizikai Folyóirat 31. kötetéhez

<i>Apagyi Barnabás</i> : A magszerkezet szerepe többnukleont átadó magreakciókban	273
<i>Beke Dezső</i> : ^{65}Zn diffúziója hígalumínium-ötvözetekben	93
<i>Bergou János</i> : Elektrodinamika lézerterekben	1
<i>Kovács István és Szenes György</i> : Sugárzási károsodás fémekben	357
<i>Lendvay Ödön</i> : Vegyületfélvezetők	509
<i>Nagy Károly, Tél Tamás</i> : Elektromágneses hullámok anizotrop közegekben	239
<i>Parragh Levente</i> : A kétfajta leptontöltéshez vezető tér vizsgálata	503
<i>Siklós Tivadar</i> : Rend-Rendezetlenség, alagutazás és fononok a ferroelektromos fázisátalakulások dinamikai modelljében	75
<i>Szenes György</i> lásd <i>Kovács István</i>	
<i>Szépfalussy Menyhárd Nóra</i> : Kvázi-egydimenziós vezetők elmélete	171
<i>Szőkefalvi-Nagy Zoltán</i> : Magnyomatékok mérése, belső mágneses terek vizsgálata Coulomb-gerjesztéssel	457
<i>Tél Tamás</i> lásd <i>Nagy Károly</i>	
<i>Varró Sándor</i> : Szabad elektronok és intenzív fény kölcsönhatásának elméleti vizsgálata	399
<i>Zsoldos Lehel</i> : Deformációeloszlás meghatározása egykristályhordozók felületi rétegében a röntgen reflexiós görbe alapján	337